

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CENTRO DE CIÊNCIAS FÍSICAS E MATEMÁTICAS

TRANSIÇÕES DE FASE INDUZIDAS PELO CAMPO
NUM MODELO COM ORDENAMENTO HELICOIDAL DE
SPINS.

TESE SUBMETIDA À UNIVERSIDADE FEDERAL DE
SANTA CATARINA PARA OBTENÇÃO DO GRAU DE
"MESTRE EM CIÊNCIAS"

ANDREA REGINA ZENI


FLORIANÓPOLIS
SANTA CATARINA - BRASIL
DEZEMBRO - 1986.

11

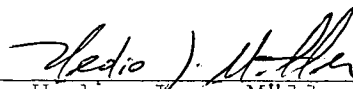
TRANSIÇÕES DE FASE INDUZIDAS PELO CAMPO
NUM MODELO COM ORDENAMENTO HELICOIDAL
DE SPINS.

ANDREA REGINA ZENI

ESTA TESE FOI JULGADA E APROVADA EM SUA
FORMA FINAL PELO ORIENTADOR E MEMBROS DA
BANCA EXAMINADORA.



Prof. Dr. Wagner Figueiredo
Orientador

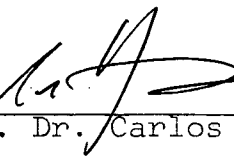


Prof. Dr. Hedio Jose Müller
Coordenadora

BANCA EXAMINADORA:



Prof. Dr. Wagner Figueiredo



Prof. Dr. Carlos Castilla Becerra



Prof. Dr. Vitor Hugo Ferreira dos Santos

Aos meus pais.

AGRADECIMENTOS

- Ao Professor Wagner Figueiredo pelo apoio e dedicação na orientação deste trabalho.
- Aos colegas do curso, pela amizade.
- Ao Professor Jason Alfredo Carlson Gallas pela ajuda prestada no uso do computador.
- Aos Órgãos financiadores CAPES e CNPq.

RESUMO

Neste trabalho estudamos as transições de fase induzidas pelo campo num modelo de Heisenberg, com uma anisotropia de íon único ortorrômbica e que exhibe ordenamento helicoidal dos spins. Em particular consideramos as transições de fase observadas no MnP quando um campo magnético é aplicado ao longo do seu eixo intermediário. Determinamos as transições de fase a $T = 0$ entre as fases helicoidal-fan e fan-paramagnética. Utilizando o formalismo de ondas de spin pudemos estudar as excitações elementares nas três fases características do MnP na região de baixas temperaturas. A fronteira de fase helicoidal-fan é de primeira ordem enquanto que a fronteira fan-paramagnética é de segunda ordem. Levando-se em conta as interações entre as ondas de spin na fase paramagnética, mostramos que o campo crítico da transição paramagnética-fan varia assintoticamente com a temperatura segundo uma lei do tipo T^2 na região de baixas temperaturas.

ABSTRACT

In this work we study the phase transitions induced by the field in the Heisenberg model with orthorhombic single-ion anisotropy and which also presents helical spin ordering. In particular, we consider the phase transitions observed in the MnP when a magnetic field is applied along its intermediate axis of magnetization. We determined the helical-fan and fan-paramagnetic phase transitions at $T = 0$. Using spin-wave theory we studied the elementary excitations in the three characteristic phases of the MnP at low temperatures. The phase boundary helical-fan is of the first order, while the fan-paramagnetic phase boundary is of the second order. Taking into account the spin-wave interactions in the paramagnetic phase, we show that the critical field of the paramagnetic-fan transition varies asymptotically according to a T^2 law in the low temperature region.

ÍNDICE

Introdução.....	1
CAPÍTULO I - Formulação do Hamiltoniano de Spins.....	5
1 - Ordenamento Helicoidal de Spins.....	5
2 - Formulação do Hamiltoniano.....	6
3 - Campos Críticos para Temperatura Zero.....	9
CAPÍTULO II - Ondas de Spin para o Hamiltoniano com Simetria Ortorrômbica.....	21
CAPÍTULO III - Fase Paramagnética.....	29
1 - Aproximação Independente da Temperatura.....	32
2 - Diagonalização do Hamiltoniano.....	36
3 - Aproximação Dependente da Temperatura.....	38
CAPÍTULO IV - Fase Fan.....	49
CAPÍTULO V - Fase Helicoidal.....	53
CONCLUSÕES.....	63
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	66

INTRODUÇÃO

Neste trabalho estudamos as excitações de ondas de spins em um modelo de Heisenberg anisotrópico e com interações de intercâmbio competitivas. Em particular, o modelo considerado é apropriado para descrever as transições de fase em baixas temperaturas induzidas no MnP por um campo magnético aplicado na direção do eixo magnético intermediário deste composto.

O fosfeto de manganês é um sistema que apresenta ordenamento helicoidal de spins. O estudo de sistemas helicoidais de spins é bastante recente. No capítulo I deste trabalho exibimos as características essenciais dos sistemas com ordenamento helicoidal de spins. Uma revisão detalhada desses sistemas, envolvendo cálculos de campo médio e teoria de ondas de spin, na determinação de suas propriedades termodinâmicas é apresentado por Nagamiya¹.

O interesse no estudo das transições de fase no MnP cresceu consideravelmente nos últimos anos devido à existência de um ponto de Lifshitz neste material².

A figura (a), tirada da ref. 2 mostra o diagrama de fases magnéticas do MnP quando o campo magnético é aplicado na direção do eixo intermediário. Para temperaturas menores que T_α o MnP apresenta três tipos de ordenamento magnético: helicoidal, fan e paramagnético. A transição da fase helicoidal para a fase fan é de primeira ordem e a transição de fase fan para a fase paramagnética é de segunda ordem.

rísticos de ordenamentos helicoidais.

No Capítulo I determinamos ainda as transições entre as fases helicoidal, fan e paramagnética à temperatura nula, pois neste caso os cálculos são mais simples e ajudam a compreender melhor os resultados dos capítulos posteriores, onde usamos o formalismo de ondas de spin para temperaturas finitas. Quando o campo magnético é aplicado na direção do eixo intermediário, ocorre uma transição de primeira ordem da fase helicoidal para a fase fan. Na fase fan os vetores de spin variam senoidalmente de plano a plano, formando um leque. Quando aumentamos o campo magnético o leque vai se fechando até chegar num campo crítico em que os spins estão totalmente alinhados com o campo, e ocorre a transição para a fase paramagnética. Esta transição é de segunda ordem.

No Capítulo II escrevemos o hamiltoniano em função dos operadores de criação e destruição de ondas de spin que será utilizado nos capítulos posteriores. Os termos do hamiltoniano que fornecem as interações entre as ondas de spin só serão considerados na fase paramagnética. Nas fases fan e helicoidal tomamos apenas a parte do hamiltoniano correspondente à aproximação harmônica.

Os espectros de energia em cada uma das fases são determinados à partir das equações de movimento dos operadores de criação e destruição de ondas de spin na representação de Heisenberg. As transições de fase são obtidas quando ocorre uma instabilidade numa determinada fase, ou seja, quando a frequência de um dado modo do espectro vai a zero.

A fase paramagnética é estudada no Capítulo III, que dividimos em duas partes: na primeira parte o espectro de energia é obtido à partir da aproximação harmônica, ou seja, independente da temperatura. Na segunda parte encontramos o espectro

de energia renormalizado, isto é, dependente da temperatura. Esta dependência com a temperatura aparece naturalmente quando desacoplamos os termos que dão as interações entre as ondas de spin.

No Capítulo IV estudamos a fase fan. Próximo à transição fan - paramagnética não encontramos dificuldades em descrever o comportamento do sistema de spins, e encontramos que o campo da transição fan paramagnética coincide com o campo da transição paramagnética - fan, isto é, temos uma transição de segunda ordem. Não conseguimos contudo, determinar a fronteira fan - hélice. Até agora não existe nenhuma teoria exata para esta transição, que do ponto de vista experimental é considerada de primeira ordem. Os campos críticos obtidos por Nagamiya¹ e Cooper e Elliott⁷ para a transição fan - hélice a $T = 0$ não são conclusivos quanto à ordem de transição e o próprio campo crítico obtido neste caso depende de considerações não facilmente justificáveis conforme veremos no Capítulo V.

Ainda no Capítulo V, são consideradas as excitações de ondas de spin na fase helicoidal. Inicialmente, os efeitos da anisotropia e do campo magnético são considerados de forma que harmônicos de mais alta ordem são necessários na descrição desta fase. Isto torna o problema de obtenção do espectro de energias dos magnons extremamente complexo e consideraremos apenas o modo de excitação uniforme e os modos a ele acoplados em primeira ordem no campo e anisotropia. Discutimos ainda as energias dos modos que podem ser excitados em função da anisotropia do sistema. Em seguida apresentamos as principais conclusões deste trabalho e sugestões para investigação futuras nesta área de estudo.

CAPÍTULO I

Formulação do Hamiltoniano de Spins

1. Ordenamento Helicoidal de Spins:

Num sistema magnético helicoidal os vetores de spin em cada camada encontram-se alinhados, mas este alinhamento varia de camada para camada, formando uma hélice com vetor de propagação \vec{Q} . Na figura I.1 mostramos alguns arranjos helicoidais de spin.

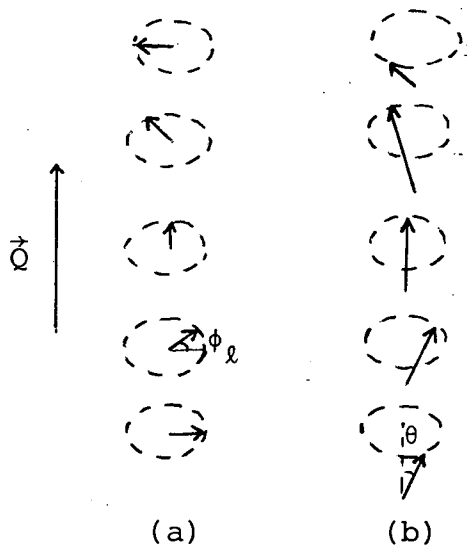


Figura I.1 - (a) Espiral: o vetor de onda \vec{Q} é normal ao plano de spins.

(b) Cone: o vetor de onda de propagação é paralelo ao eixo do cone.

A configuração dos spins é determinada pela competição entre as interações de intercâmbio e pela anisotropia. No caso de uma anisotropia planar os spins permanecem no plano e o vetor de onda \vec{Q} é normal a este plano. A aplicação de um campo magnético

co também é importante na determinação da configuração dos spins. No caso do arranjo cônico (fig. I.1b), por exemplo, um campo magnético aplicado paralelo à direção de propagação do vetor de onda \vec{Q} , determina o valor do ângulo θ . Quanto maior for o valor do campo magnético aplicado, tanto menor será o valor do ângulo θ .

É importante observar que para a existência do ordenamento helicoidal é essencial que as interações de intercâmbio não sejam confinadas aos vizinhos mais próximos, e que além disso, sejam competitivas.

2. Formulação do Hamiltoniano:

Consideramos para o MnP um modelo de spins localizados⁶, numa rede cúbica simples, dividida em planos, dentro dos quais as interações de intercâmbio são ferromagnéticas. As interações entre íons situados nos primeiros planos vizinhos também são ferromagnéticas, enquanto que as interações entre íons localizados nos segundos planos vizinhos são antiferromagnéticas. Para o MnP, cuja estrutura cristalina é ortorrômbica, o eixo a é o eixo de fácil magnetização, b o eixo intermediário e c é o eixo duro. Em nosso hamiltoniano o eixo x coincide com a , o eixo y com b e o eixo z com a direção do eixo duro c . Incluímos ainda em nosso hamiltoniano uma anisotropia ortorrômbica no plano xy . O campo magnético é aplicado ao longo do eixo intermediário.

Escrevemos o seguinte hamiltoniano de spin para o sistema:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & - \frac{J_0}{2} \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i'} - \frac{J_1}{2} \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_9 - \frac{J_2}{2} \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_f \\ & - \frac{D}{2} \sum_i [(S_i^x)^2 - (S_i^y)^2] - g \mu_B H \sum_i S_i^y \end{aligned} \quad (I.1)$$

onde J_0 é a interação de intercâmbio entre primeiros vizinhos no plano; J_1 e J_2 são as interações de intercâmbio entre primeiros e segundos vizinhos na direção z , respectivamente, D representa a anisotropia ortorrômbica de íon único e H é o campo magnético externo aplicado na direção do eixo intermediário.

Tomamos o parâmetro de anisotropia D como sendo positivo, o que privilegia a direção do eixo fácil x . Portanto, a posição de equilíbrio dos spins é no plano xy . Se $T = 0$ os spins não têm componente na direção z . Contudo, quando consideramos ondas de spin assumimos que os spins podem ter pequenos desvios a partir do plano xy e, portanto, componentes na direção z .

Definimos as transformadas de Fourier para os parâmetros de intercâmbio em função do vetor de onda \vec{q} por:

$$J(\vec{q}) = J_0 z_0 \gamma_{\vec{q}} + J_1 z_1 \gamma'_{\vec{q}} + J_2 z_2 \gamma''_{\vec{q}} \quad (I.2)$$

onde $J(\vec{q}) = J(-\vec{q})$ e z_0 é o número de primeiros vizinhos no plano z_1 e z_2 são os números de primeiros e segundos vizinhos na direção z , respectivamente e γ , γ' e γ'' são os fatores de estrutura da rede considerada. Para os primeiros vizinhos no plano, $z_0 = 4$ e

$$\gamma_{\vec{q}} = \frac{1}{z_0} \sum_{\vec{\alpha}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{\alpha}} = \frac{1}{2} (\cos q_x a + \cos q_y a) \quad , \quad (I.3a)$$

onde a é a distância entre primeiros vizinhos no plano. Para os primeiros vizinhos na direção z , $z_1 = 2$ e

$$\gamma'_{\vec{q}} = \frac{1}{z_1} \sum_{\vec{c}} e^{i\vec{q} \cdot \vec{c}} = \cos q_z c \quad (\text{I.3b})$$

Para os segundos vizinhos, $z_2 = 2$ e

$$\gamma''_{\vec{q}} = \cos 2 q_z c \quad , \quad (\text{I.3c})$$

onde c é o espaçamento da rede na direção z .

Na fase helicoidal os vetores de spin em cada plano são paralelos entre si, mas a direção de alinhamento varia de plano para plano, formando uma hélice com um vetor de onda \vec{q} paralelo ao eixo z . Quando isto acontece as componentes x e y do vetor de onda são iguais a zero e a equação (I.2) fica reduzida a:

$$J(\vec{q}) = J_0 z_0 + J_1 z_1 \cos q_z c + J_2 z_2 \cos 2 q_z c \quad . \quad (\text{I.4})$$

A energia na fase helicoidal é mínima se $J(\vec{q})$ é a maior possível. Isto impõe certas condições a serem satisfeitas pelo vetor de onda \vec{q} . Maximizando-se a equação (I.4) teremos:

$$[J_1 + 4J_2 \cos q_z c] \sin q_z c = 0.$$

Se $q_z = 0$ o arranjo de spins é ferromagnético, $q_z c = \frac{\pi}{c}$ o arranjo de spins é antiferromagnético, e se $\cos q_z c = -\frac{J_1}{4J_2}$ teremos um arranjo helicoidal¹, desde que $J_1 < 4 |J_2|$.

Chamando de \vec{Q} o vetor de onda que torna $J(\vec{q})$ máximo, temos que:

$$\vec{Q} = (q_x = 0, q_y = 0, \cos q_z c = -\frac{J_1}{4J_2}) \quad (I.5)$$

É fácil verificar que o estado com uma configuração helicoidal de spins, isto é, $J(\vec{Q}) = 4J_0 - \frac{J_1^2}{4J_2} - 2J_2$, apresenta menor energia que $J(0) = 4J_0 + 2J_1 + 2J_2$ e $J(\pi/c) = 4J_0 - 2J_1 + 2J_2$, desde que $J_1 < 4 |J_2|$, e lembrando que J_0 e J_1 são positivos e J_2 é negativo.

3. Campos Críticos para Temperatura Zero

Vamos assumir que a posição de equilíbrio dos vetores de spin na l -ésima camada formam um ângulo ϕ_l com a direção x . Se $T = 0$ os spins permanecem no plano xy e suas componentes são dadas por:

$$S_l^x = S \cos \phi_l,$$

$$S_l^y = S \sin \phi_l, \quad (I.6)$$

$$S_l^z = 0.$$

Com (I.6) o hamiltoniano (I.1) fica:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} = & - \frac{J_0 S^2}{2} \sum_{i,i'} \cos(\phi_i - \phi_{i'}) - \frac{J_1 S^2}{2} \sum_{i,g} \cos(\phi_i - \phi_g) \\
 & - \frac{J_2 S^2}{2} \sum_{i,f} \cos(\phi_i - \phi_f) \\
 & - \frac{D S^2}{2} \sum_i \cos 2\phi_i - g \mu_B H S \sum_i \sin \phi_i
 \end{aligned} \tag{I.7}$$

3.1 - Fase Paramagnética

Na fase paramagnética todos os spins estão alinhados com o campo, logo $\phi_\ell = \pi/2$ e a energia por spin é dada por:

$$\frac{E^{\text{Para}}}{N} = - \frac{S^2}{2} J(0) + \frac{D S^2}{2} - g \mu_B H S \tag{I.8}$$

3.2 - Fase Helicoidal

Se o campo magnético é nulo o arranjo de spins é uma hêlice com $\phi_\ell = \vec{Q} \cdot \vec{R}_\ell$, onde \vec{Q} é o vetor de onda perpendicular ao plano dos spins. Na presença de anisotropia e campos magnéticos, a hêlice será distorcida⁷ e devemos fazer uma correção na expressão de ϕ_ℓ caso o campo e a anisotropia sejam consideráveis. Desprezando no momento essas correções e colocando-se $\phi_\ell = \vec{Q} \cdot \vec{R}_\ell$ em (I.7), obtemos a energia por spin na fase helicoidal:

$$\frac{E_{\text{Hel}}}{N} = - \frac{J^2}{2} J(\vec{Q}) \quad (\text{I.9})$$

Na determinação da equação (I.9) tivemos que avaliar somas do tipo:

$$1) \sum_{\ell, g} \cos \vec{Q} \cdot (\vec{R}_\ell - \vec{R}_g) \quad 2) \sum_{\ell} \cos 2 \vec{Q} \cdot \vec{R}_\ell$$

Para avaliar essas somas reportamo-nos a figura (I.2) onde procuramos mostrar esquematicamente a posição dos spins em cada plano.

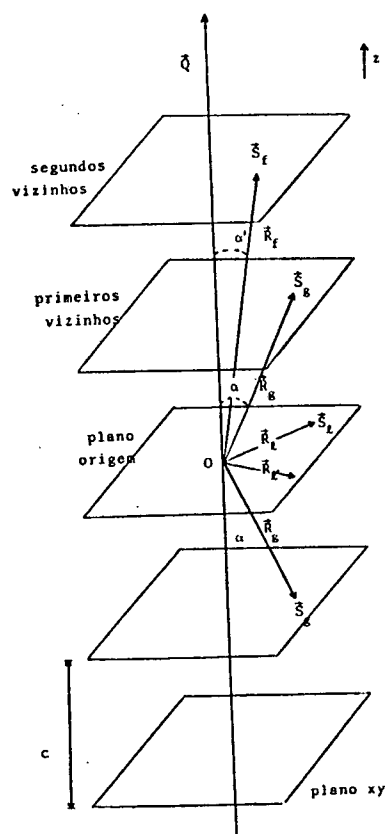


Figura I.2 - Em cada plano todos os spins apontam na mesma direção. c é a distância entre planos sucessivos. A distância entre primeiros vizinhos num mesmo plano é a .

Se, $z > 0$, $\vec{Q} \cdot \vec{R}_g = |\vec{Q}| |\vec{R}_g| \cos \alpha = Qc$

$z < 0$, $\vec{Q} \cdot \vec{R}_g = |\vec{Q}| |\vec{R}_g| \cos (\pi - \alpha) = -Qc$

Então, $\sum_{\ell, g} \cos \vec{Q} \cdot (\vec{R}_\ell - \vec{R}_g) = N \{ \cos \vec{Q} \cdot \vec{R}_g + \cos \vec{Q} \cdot \vec{R}_g \} = 2N \cos Qc$

Analogamente, para os segundos vizinhos na direção z , temos:

$$\sum_f \cos(\vec{Q} \cdot \vec{R}_e - \vec{Q} \cdot \vec{R}_f) = 2N \cos 2Qc.$$

Para avaliar a outra soma, $\sum_\ell \cos 2\vec{Q} \cdot \vec{R}_\ell$, vamos supor que haja N_1 spins em cada plano e que o número de planos seja $2n$, isto é, o número total de spins é $N = 2N_1n$.

Neste caso teremos:

$$1) \text{ plano da origem: } \cos 2\vec{Q} \cdot \vec{R}_e = \cos 2(|Q||R_e| \cos \pi/2) = 1$$

$$2) \text{ primeiro plano, } z=c : \cos 2\vec{Q} \cdot \vec{R}_e = \cos 2Qc$$

$$3) \text{ segundo plano, } z=2c : \cos 2\vec{Q} \cdot \vec{R}_e = \cos 4Qc$$

$$n) \text{ n-ésimo plano, } z=nc : \cos 2\vec{Q} \cdot \vec{R}_e = \cos 2nQc$$

Portanto, ficamos com:

$$\sum_\ell \cos 2\vec{Q} \cdot \vec{R}_\ell = N_1 + 2N_1 (\cos 2Qc + \cos 4Qc + \dots + \cos 2nQc),$$

ou seja,

$$\frac{1}{N} \sum_\ell \cos 2\vec{Q} \cdot \vec{R}_\ell = -2 \frac{N_1}{N} Qc \frac{\sin(n + \frac{1}{2})}{\sin Qc}, \text{ que}$$

vai a zero no limite termodinâmico.

3.3 - Fase Fan

Na fase fan os vetores de spin mudam senoidalmente à medida que percorremos os diferentes planos. O centro de oscilação pode ser tomado como sendo a direção do campo, apesar da anisotropia.

Escolhendo a seguinte expressão para o ângulo ϕ_k , em função da amplitude de oscilação δ ,

$$\phi_k = \frac{\tilde{I}_1}{2} + \delta \sin \vec{Q} \cdot \vec{R}_k \quad (\text{I.10})$$

e levando-se esta expressão no hamiltoniano (I.7), obtemos a energia por spin na fase fan:

$$\begin{aligned} \frac{E^{\text{Fan}}}{N} = & -\frac{S^2}{2} J(0) + \frac{DS^2}{2} - g\mu_B HS \\ & + \delta^2 \left\{ \frac{S^2}{4} [J(0) - J(\vec{Q})] - \frac{DS^2}{2} + \frac{g\mu_B HS}{4} \right\} \\ & + \delta^4 \left\{ \frac{S^2}{64} [4J(\vec{Q}) - J(2\vec{Q}) - 3J(0)] + \frac{DS^2}{8} - \frac{g\mu_B HS}{64} \right\} \quad (\text{I.11}) \end{aligned}$$

Na expressão acima tivemos que avaliar somas do tipo:

$$J_0 \sum_{i,i'} \cos(\phi_i - \phi_{i'}) + J_1 \sum_{i,g} \cos(\phi_i - \phi_g) + J_2 \sum_{i,f} \cos(\phi_i - \phi_f) =$$

$$\begin{aligned}
= & N J_0 z_0 + 2 N_1 J_1 \sum_{n=0}^N \left\{ \cos [f \sin(nQ_c) - f \sin(n+1)Q_c] \right. \\
& + \cos [f \sin(nQ_c) - f \sin(n-1)Q_c] \left. \right\} \\
& + 2 N_1 J_2 \sum_{n=0}^N \left\{ \cos [f \sin(nQ_c) - f \sin(n+2)Q_c] \right. \\
& + \cos [f \sin(nQ_c) - f \sin(n-2)Q_c] \left. \right\}.
\end{aligned}$$

Expandindo os termos em cosseno até quarta ordem em δ e desprezando aqueles que não contribuem no limite termodinâmico, ficamos com:

$$N \left\{ J(0) + \frac{f^2}{2} [J(\vec{Q}) - J(0)] + \frac{f^4}{32} [3J(0) - J(2\vec{Q}) - 4J(\vec{Q})] \right\}$$

Devido a expansão em δ , a energia obtida na fase fan só é válida para valores pequenos de δ , ou seja, próxima da transição de fase fan paramagnética.

No processo de minimização da energia com respeito a δ , obtém-se 2 raízes:

$$1^a) \quad f = 0 \quad (I.12a)$$

$$2^a) \quad f^2 = \frac{a - 8g_{40}H}{b - 9g_{40}H} \quad (I.12b)$$

$$\text{onde: } a = -8J [J(0) - J(\vec{Q})] + 16DS \quad e \quad (I.13)$$

$$b = -J [J(2\vec{Q}) + 3J(0) - 4J(\vec{Q})] + 8DS$$

A primeira solução só é possível se $g_{40}H > a/8$

e de fato, $\delta = 0$, corresponde à fase paramagnética.

Para que a segunda solução seja um mínimo é necessário que $g\mu_0 H < a/8$ e $g\mu_0 H < b$, ou melhor, $g\mu_0 H < \frac{a}{8}$, já que para qualquer valor da anisotropia $b > \frac{a}{8}$.

Quando o campo atinge o valor crítico $g\mu_0 H = a/8$, $\delta = 0$ e obtemos a transição de fase fan paramagnética. Neste caso o campo crítico é dado por:

$$g\mu_0 H = \frac{a}{8} \quad (I.14)$$

Usando o valor de b dado em (I.13) e do campo crítico dado em (I.14) na equação (I.12b), temos:

$$\mathcal{J}^2 = \frac{8(g\mu_0 H)^{F-P} - g\mu_0 H}{-5[J(2Q) + 3J(0) - 4J(Q)] + 8DS - g\mu_0 H} \quad (I.15)$$

Substituindo (I.12b) em (I.11), encontramos a energia na fase fan em termos de a e b :

$$\frac{E^{Fan}}{N} = -\frac{J^2}{2}J(0) + \frac{DS^2}{2} - g\mu_0 HS - \frac{5}{64} \frac{(a - 8g\mu_0 H)^2}{(b - g\mu_0 H)} \quad (I.16)$$

3.4 - Transição Hélice - Fan

Iguando-se as energias livres (I.9) e (I.16) das fases helicoidal e fan, encontramos o campos de transição hélice-

fan:

$$g \mu_B H^{H-F} = \frac{a^2 - 4ab + 32bDS}{12a + 32DS - 64b} \quad (I.17)$$

em termos de a e b .

3.5 - Transição Fan - Paramagnética

O campo da transição fan - paramagnética é obtido das equações (I.8) e (I.16):

$$g \mu_B H^{F-P} = 5 [J(\vec{Q}) - J(0)] + 2DS \quad (I.18)$$

que é o resultado esperado, pois já havíamos encontrado este campo em (I.14) quando minimizamos a energia da fase fan e tomamos a amplitude de oscilação tendendo a zero.

3.6 - Valor de δ na Transição Fan - Hélice

Substituindo o campo da transição (I.17) em (I.12b) encontramos o valor de δ na transição fan-hélice:

$$\int^2 = \frac{5 [J(\vec{Q}) - J(0) + D] \left(\frac{a}{2} - 4b \right) - \frac{a^2}{8} + ab}{\left(\frac{a}{8} - b \right)^2} \quad (I.19)$$

Note que este valor pode não ter muito significado físico, pois foi obtido supondo δ pequeno. Contudo, a amplitude de oscilação pode não ser pequena na transição hélice-fan. Neste caso, na expansão que realizamos para δ , deveríamos ter incluído termos de mais alta ordem.

3.7 - Cálculo da Magnetização e Susceptibilidade

Das energias livres (I.8), (I.9) e (I.16) obtemos as magnetizações e susceptibilidades por spin nas três fases:

1) Fase Paramagnética:

$$M = S \quad (I.20)$$

$$\chi = 0$$

2) Fase Helicoidal:

$$M = 0 \quad (I.21)$$

$$\chi = 0$$

3) Fase Fan:

$$M = g\mu_B S - \frac{g\mu_B S}{4} \frac{(a - 8g\mu_B H)}{(b - g\mu_B H)} + \frac{g\mu_B S}{64} \left(\frac{a - 8g\mu_B H}{b - g\mu_B H} \right)^2 \quad (I.22)$$

$$\chi = \frac{2S(g\mu_B)^2}{(b - g\mu_B H)} - \frac{S(g\mu_B)^2}{2} \frac{(a - 8g\mu_B H)}{(b - g\mu_B H)^2} + \frac{S(g\mu_B)^2}{32} \frac{(a - 8g\mu_B H)^2}{(b - g\mu_B H)^3}$$

A figura I.3 é um esboço da magnetização em função do campo magnético para $T = 0$. Ela nos mostra que a transição hélice-fan é de primeira ordem, enquanto que a transição fan-paramagnética é de segunda ordem.

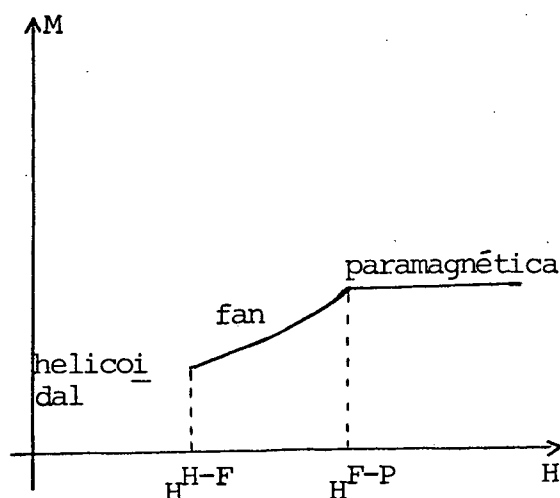


Figura I.3 - Magnetização por spin em função do campo.

3.8 - Comentários

A fase fan só existe se $H^{F-P} > H^{H-P}$. Se esta condição não for satisfeita, teremos a transição hélice-paramagnética direta, sem passar pela fan.

As energias das fases helicoidal e paramagnética são dadas por:

$$\frac{E_{\text{Para}}}{N} = -\frac{S^2}{2} J(0) + \frac{DS^2}{2} - g\mu_B HS \quad (\text{I.8})$$

$$\frac{E_{\text{Hel}}}{N} = -\frac{S^2}{2} J(\vec{Q}) \quad (\text{I.9})$$

Colocando-se isto num gráfico e considerando-se que $E^H < E^P$ para $H = 0$, temos que:

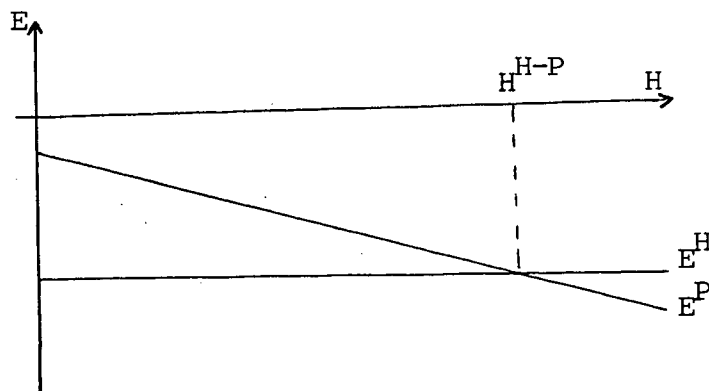


Figura I.4 - Energias das fases paramagnética e fan em função do campo, para $T = 0$.

onde H^{H-P} é o campo da transição hélice-paramagnética e é dado igualando-se as energias (I.8) e (I.9):

$$g\mu_B H^{H-P} = \frac{S}{2} [J(\tilde{Q}) - J(0)] + \frac{DS}{2} \quad (I.23)$$

Para que a fase fan exista entre as fases helicoidal e paramagnética é preciso que para uma região de valores do campo menores que H^{F-P} , a energia da fase fan possa ser menor que as energias correspondentes das fases helicoidal e paramagnética. Na figura I.5, apresentamos o diagrama das energias das três fases em função do campo magnético. Verificamos que se $0 \leq H < H^{H-F}$, a fase estável é a helicoidal, se $H^{H-F} < H < H^{F-P}$, a fase estável é a fase fan e, finalmente de $H > H^{F-P}$ a fase estável é a paramagnética.

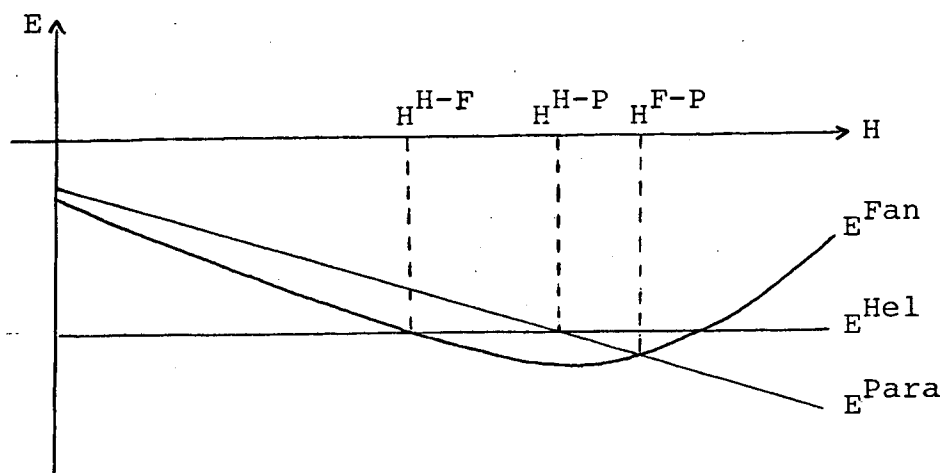


Figura I.5 - H^{H-F} , H^{H-P} e H^{F-P} são os campos de transição hélice-fan, hélice-paramagnética e fan-paramagnética. Estes campos são dados pelas equações (I.17), (I.23) e (I-18).

CAPÍTULO II

Ondas de Spin para o Hamiltoniano com Simetria Ortorrômbica

Neste capítulo estudamos as ondas de spin para o hamiltoniano definido em (I.1). Continuaremos assumindo que ϕ_ℓ é o ângulo que os vetores de spin formam com a direção \hat{x} e que a posição de equilíbrio dos spins está localizada no plano xy , exceto que agora os spins podem se desviar, ou seja, ter uma componente na direção z .

Inicialmente é conveniente introduzirmos um novo sistema de coordenadas, tal que o eixo ζ coincida com a direção de equilíbrio dos spins em cada ponto da rede, o eixo ξ seja normal a esta direção no plano xy , e o eixo η seja paralelo ao eixo z . Neste caso temos:

$$\begin{aligned} S_i^x &= -S_{i\xi} \sin \phi_i + S_{i\zeta} \cos \phi_i \\ S_i^y &= S_{i\xi} \cos \phi_i + S_{i\zeta} \sin \phi_i \\ S_i^z &= S_{i\eta} \end{aligned} \tag{II.1}$$

Levando (II.1) no hamiltoniano (I.1), obtêm-se:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} = & -\frac{J_0}{2} \sum_{\ell\ell'} \left[S_{\ell\zeta} S_{\ell'\zeta} \cos(\phi_\ell - \phi_{\ell'}) - S_{\ell\zeta} S_{\ell'\eta} \sin(\phi_\ell - \phi_{\ell'}) \right. \\
& \left. + S_{\ell\eta} S_{\ell'\zeta} \sin(\phi_\ell - \phi_{\ell'}) + S_{\ell\eta} S_{\ell'\eta} \cos(\phi_\ell - \phi_{\ell'}) \right] \\
& -\frac{J_1}{2} \sum_{\ell\eta} \left[S_{\ell\zeta} S_{\eta\zeta} \cos(\phi_\ell - \phi_\eta) - S_{\ell\zeta} S_{\eta\eta} \sin(\phi_\ell - \phi_\eta) \right. \\
& \left. + S_{\ell\eta} S_{\eta\zeta} \sin(\phi_\ell - \phi_\eta) + S_{\ell\eta} S_{\eta\eta} \cos(\phi_\ell - \phi_\eta) \right] \\
& -\frac{J_2}{2} \sum_{\ell f} \left[S_{\ell\zeta} S_{f\zeta} \cos(\phi_\ell - \phi_f) - S_{\ell\zeta} S_{f\eta} \sin(\phi_\ell - \phi_f) \right. \\
& \left. + S_{\ell\eta} S_{f\zeta} \sin(\phi_\ell - \phi_f) + S_{\ell\eta} S_{f\eta} \cos(\phi_\ell - \phi_f) \right] \\
& -\frac{D}{2} \sum_{\ell} \left[-(S_{\ell\zeta})^2 \cos(2\phi_\ell) + (S_{\ell\eta})^2 \cos 2\phi_\ell \right. \\
& \left. - (S_{\ell\zeta} S_{\ell\eta} + S_{\ell\eta} S_{\ell\zeta}) \sin 2\phi_\ell \right] \\
& - g \mu_B H \sum_{\ell} \left[S_{\ell\zeta} \cos \phi_\ell + S_{\ell\eta} \sin \phi_\ell \right] \quad (II.2)
\end{aligned}$$

Vamos definir os seguintes operadores de spin:

$$\begin{aligned}
S_{\ell}^{+} &= S_{\ell\zeta} + i S_{\ell\eta} \\
S_{\ell}^{-} &= S_{\ell\zeta} - i S_{\ell\eta}
\end{aligned} \quad (II.3)$$

e usar as transformações de Holstein-Primakoff⁸:

$$\begin{aligned}
S_{\ell}^{+} &= (2S)^{1/2} \left(1 - \frac{a_{\ell}^{\dagger} a_{\ell}}{2S} \right)^{1/2} a_{\ell} \\
S_{\ell}^{-} &= (2S)^{1/2} a_{\ell}^{\dagger} \left(1 - \frac{a_{\ell}^{\dagger} a_{\ell}}{2S} \right)^{1/2} \\
S_{\ell}^z &= S - a_{\ell}^{\dagger} a_{\ell}
\end{aligned} \quad (II.4)$$

que expressa os operadores s_{ℓ}^{+} , s_{ℓ}^{-} e s_{ℓ} em termos dos operadores de criação e destruição de desvios de spin em cada ponto da rede, a_{ℓ}^{+} e a_{ℓ} satisfazendo a relação de comutação: $[a_{\ell}, a_{\ell}^{+}] = 1$.

Chamando $f_{\ell}(S) = (1 - \frac{a_{\ell}^{+} a_{\ell}}{2S})^{1/2}$ em (II.4) e expandindo este operador, temos que:

$$f_{\ell}(S) = 1 - \frac{1}{2} \frac{a_{\ell}^{+} a_{\ell}}{2S} - \frac{1}{2} \frac{(a_{\ell}^{+} a_{\ell})^2}{16S^2} - \frac{1}{2} \frac{(a_{\ell}^{+} a_{\ell})^3}{64S^3} - \dots$$

Usando as relações de comutação dos operadores de criação e destruição podemos escrever:

$$(a_{\ell}^{+} a_{\ell})^2 = a_{\ell}^{+} a_{\ell} + a_{\ell}^{+2} a_{\ell}^2$$

$$(a_{\ell}^{+} a_{\ell})^3 = a_{\ell}^{+} a_{\ell} + a_{\ell}^{+2} a_{\ell}^2 + a_{\ell}^{+2} a_{\ell}^2 a_{\ell}^{+} a_{\ell}$$

Levando-se isto em $f_{\ell}(S)$ e considerando apenas os termos com até dois operadores, ficamos com:

$$f_{\ell}(S) = 1 + \left[-\frac{1}{2} \frac{1}{2S} - \frac{1}{2} \frac{1}{16S^2} - \frac{1}{2} \frac{1}{64S^3} - \dots \right] a_{\ell}^{+} a_{\ell}$$

$$f_{\ell}(S) = 1 + \left[\left(1 - \frac{1}{2S}\right)^{1/2} - 1 \right] a_{\ell}^{+} a_{\ell}$$

(II.5)

$$f_{\ell}(S) = 1 + [\zeta - 1] a_{\ell}^{+} a_{\ell}$$

onde;

$$\zeta = \left(1 - \frac{1}{2S}\right)^{1/2} \quad (\text{II.6})$$

Esta expansão é válida apenas na região de baixas temperaturas onde $\frac{\langle a_{\vec{\ell}}^{\dagger} a_{\vec{\ell}} \rangle}{2S} \ll 1$, isto é, o valor esperado do número de desvios de spin no ponto $\vec{\ell}$ da rede é muito menor que o valor máximo possível, o qual é $2S$.

Usando a expansão (II.5) em (II.4), obtém-se:

$$\begin{aligned} S_{\vec{\ell}}^+ &= (2S)^{1/2} [a_{\vec{\ell}} + (\zeta - 1) a_{\vec{\ell}}^{\dagger} a_{\vec{\ell}}] , \\ S_{\vec{\ell}}^- &= (2S)^{1/2} [a_{\vec{\ell}}^{\dagger} + (\zeta - 1) a_{\vec{\ell}}^{\dagger 2} a_{\vec{\ell}}] \\ S_{\vec{\ell}}^z &= S - a_{\vec{\ell}}^{\dagger} a_{\vec{\ell}} \end{aligned} \quad (\text{II.7})$$

Queremos escrever o hamiltoniano em função dos operadores de desvio de spin. De (II.3) temos:

$$S_{\vec{\ell}\vec{\zeta}} = \frac{1}{2} (S_{\vec{\ell}}^+ + S_{\vec{\ell}}^-) \quad (\text{II.8})$$

$$S_{\vec{\ell}\vec{\eta}} = \frac{1}{2i} (S_{\vec{\ell}}^+ - S_{\vec{\ell}}^-)$$

Levando-se (II.7) em (II.8) ficamos com:

$$S_{\epsilon\zeta} = \left(\frac{S}{2}\right)^{1/2} [a_{\epsilon} + a_{\zeta}^{\dagger} + (\zeta-1)(a_{\epsilon}^{\dagger} a_{\zeta}^2 + a_{\zeta}^{\dagger 2} a_{\epsilon})]$$

$$S_{\epsilon\eta} = -i \left(\frac{S}{2}\right)^{1/2} [a_{\epsilon} - a_{\eta}^{\dagger} + (\eta-1)(a_{\epsilon}^{\dagger} a_{\eta}^2 - a_{\eta}^{\dagger 2} a_{\epsilon})] \quad (\text{II.9})$$

$$S_{\epsilon\gamma} = S - a_{\epsilon}^{\dagger} a_{\epsilon}$$

Com estas transformações levadas em (II.2), obtemos o seguinte hamiltoniano:

$$\mathcal{H} = E_0 + \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_3 + \mathcal{H}_4 \quad (\text{II.10})$$

onde:

$$\begin{aligned} E_0 = & -\frac{J_0 S^2}{2} \sum_{\epsilon\epsilon'} \cos(\phi_{\epsilon} - \phi_{\epsilon'}) - \frac{J_1 S^2}{2} \sum_{\epsilon\gamma} \cos(\phi_{\epsilon} - \phi_{\gamma}) \\ & - \frac{J_2 S^2}{2} \sum_{\epsilon f} \cos(\phi_{\epsilon} - \phi_f) - \frac{DS}{2} \left(S - \frac{1}{2}\right) \sum_{\epsilon} \cos 2\phi_{\epsilon} \\ & - g \mu_B H S \sum_{\epsilon} \sin \phi_{\epsilon} \end{aligned} \quad (\text{II.11})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_1 = & -\frac{J_0 S^2}{2} \left(\frac{S}{2}\right)^{1/2} \sum_{\epsilon\epsilon'} (-a_{\epsilon} - a_{\epsilon}^{\dagger} + a_{\epsilon'} + a_{\epsilon'}^{\dagger}) \sin(\phi_{\epsilon} - \phi_{\epsilon'}) \\ & - \frac{J_1 S^2}{2} \left(\frac{S}{2}\right)^{1/2} \sum_{\epsilon\gamma} (-a_{\epsilon} - a_{\epsilon}^{\dagger} + a_{\gamma} + a_{\gamma}^{\dagger}) \sin(\phi_{\epsilon} - \phi_{\gamma}) \\ & - \frac{J_2 S^2}{2} \left(\frac{S}{2}\right)^{1/2} \sum_{\epsilon f} (-a_{\epsilon} - a_{\epsilon}^{\dagger} + a_f + a_f^{\dagger}) \sin(\phi_{\epsilon} - \phi_f) \\ & + \frac{D}{2} \left(\frac{S}{2}\right)^{1/2} (2S-1) \sum_{\epsilon} \sin 2\phi_{\epsilon} (a_{\epsilon} + a_{\epsilon}^{\dagger}) \\ & - g \mu_B H \left(\frac{S}{2}\right)^{1/2} \sum_{\epsilon} \cos \phi_{\epsilon} (a_{\epsilon} + a_{\epsilon}^{\dagger}) \end{aligned} \quad (\text{II.12})$$

$$\begin{aligned}
\chi_2 = & - \frac{J_0 S}{2} \sum_{e'e'} \left\{ \frac{1}{2} [\cos(\phi_e - \phi_{e'}) - 1] (a_e a_{e'} + a_e^\dagger a_{e'}^\dagger) \right. \\
& + \frac{1}{2} [\cos(\phi_e - \phi_{e'}) + 1] (a_e a_{e'}^\dagger + a_e^\dagger a_{e'}) - (a_{e'}^\dagger a_{e'} + a_e^\dagger a_e) \cos(\phi_e - \phi_{e'}) \left. \right\} \\
& - \frac{J_1 S}{2} \sum_{e'g} \left\{ \frac{1}{2} [\cos(\phi_e - \phi_g) - 1] (a_e a_g + a_e^\dagger a_g^\dagger) \right. \\
& + \frac{1}{2} [\cos(\phi_e - \phi_g) + 1] (a_e a_g^\dagger + a_e^\dagger a_g) - (a_g^\dagger a_g + a_e^\dagger a_e) \cos(\phi_e - \phi_g) \left. \right\} \\
& - \frac{J_2 S}{2} \sum_{e'f} \left\{ \frac{1}{2} [\cos(\phi_e - \phi_f) - 1] (a_e a_f + a_e^\dagger a_f^\dagger) \right. \\
& + \frac{1}{2} [\cos(\phi_e - \phi_f) + 1] (a_e a_f^\dagger + a_e^\dagger a_f) - (a_f^\dagger a_f + a_e^\dagger a_e) \cos(\phi_e - \phi_f) \left. \right\} \\
& + \frac{0}{2} \sum_i \left\{ \frac{S}{2} \{ (a_i^2 + a_i^{\dagger 2}) \cos 2\phi_i + (S\gamma^2 + 2S - 1) a_i^\dagger a_i \cos 2\phi_i \} \right. \\
& + g \mu_B H \sum_i a_i^\dagger a_i \sin \phi_i \left. \right\} \quad (\text{II.13})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\chi_3 = & - \frac{J_0}{2} \left(\frac{S}{2} \right)^{1/2} \sum_{e'e'} \left\{ [a_e a_{e'}^\dagger a_{e'} + a_e^\dagger a_{e'}^\dagger a_{e'} - a_e^\dagger a_e a_{e'} - a_e^\dagger a_e a_{e'}^\dagger] \right. \\
& - S(\gamma - 1) (a_e^\dagger a_e^2 + a_e^{\dagger 2} a_e - a_{e'}^\dagger a_{e'}^2 - a_{e'}^{\dagger 2} a_{e'}) \left. \right\} \sin(\phi_e - \phi_{e'}) \\
& - \frac{J_1}{2} \left(\frac{S}{2} \right)^{1/2} \sum_{e'g} \left\{ [a_e a_g^\dagger a_g + a_e^\dagger a_g^\dagger a_g - a_e^\dagger a_e a_g - a_e^\dagger a_e a_g^\dagger] \right. \\
& - S(\gamma - 1) (a_e^\dagger a_e^2 + a_e^{\dagger 2} a_e - a_g^\dagger a_g^2 - a_g^{\dagger 2} a_g) \left. \right\} \sin(\phi_e - \phi_g) \\
& - \frac{J_2}{2} \left(\frac{S}{2} \right)^{1/2} \sum_{e'f} \left\{ [a_e a_f^\dagger a_f + a_e^\dagger a_f^\dagger a_f - a_e^\dagger a_e a_f - a_e^\dagger a_e a_f^\dagger] \right. \\
& - S(\gamma - 1) (a_e^\dagger a_e^2 + a_e^{\dagger 2} a_e - a_f^\dagger a_f^2 - a_f^{\dagger 2} a_f) \left. \right\} \sin(\phi_e - \phi_f) \\
& + \frac{0}{2} \left(\frac{S}{2} \right)^{1/2} (2S\gamma - 2S - 3\gamma + 1) \sum_i (a_i^\dagger a_i^2 + a_i^{\dagger 2} a_i) \sin 2\phi_i \\
& - g \mu_B H \left(\frac{S}{2} \right)^{1/2} (\gamma - 1) \sum_i (a_i^\dagger a_i^2 + a_i^{\dagger 2} a_i) \cos \phi_i \quad (\text{II.14})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_4 = & -\frac{J_0}{2} \sum_{i,i'} \left\{ a_i^\dagger a_i a_{i'}^\dagger a_{i'} \cos(\phi_i - \phi_{i'}) \right. \\
& + \frac{J}{2} (\gamma - 1) [\cos(\phi_i - \phi_{i'}) - 1] (a_i a_{i'}^\dagger a_i^2 + a_i^\dagger a_{i'}^2 a_{i'} + a_i^\dagger a_i^2 a_{i'} + a_i^2 a_i^\dagger a_{i'}^\dagger) \\
& + \frac{J}{2} (\gamma - 1) [\cos(\phi_i - \phi_{i'}) + 1] (a_i a_i^{\dagger 2} a_{i'}^\dagger + a_i^\dagger a_{i'}^\dagger a_i^2 + a_i^\dagger a_i^2 a_{i'}^\dagger + a_i^2 a_i a_{i'}^\dagger) \left. \right\} \\
& - \frac{J_1}{2} \sum_{i,g} \left\{ a_i^\dagger a_i a_g^\dagger a_g \cos(\phi_i - \phi_g) \right. \\
& + \frac{J}{2} (\gamma - 1) [\cos(\phi_i - \phi_g) - 1] (a_i a_g^\dagger a_g^2 + a_i^\dagger a_g^2 a_g + a_i^\dagger a_i^2 a_g + a_g^2 a_i a_g^\dagger) \\
& + \frac{J}{2} (\gamma - 1) [\cos(\phi_i - \phi_g) + 1] (a_i a_g^{\dagger 2} a_g + a_i^\dagger a_g^\dagger a_g^2 + a_i^\dagger a_i^2 a_g^\dagger + a_i^2 a_i a_g^\dagger) \left. \right\} \\
& - \frac{J_2}{2} \sum_{i,f} \left\{ a_i^\dagger a_i a_f^\dagger a_f \cos(\phi_i - \phi_f) \right. \\
& + \frac{J}{2} (\gamma - 1) [\cos(\phi_i - \phi_f) - 1] (a_i a_f^\dagger a_f^2 + a_i^\dagger a_f^2 a_f + a_i^\dagger a_i^2 a_f + a_f^2 a_i a_f^\dagger) \\
& + \frac{J}{2} (\gamma - 1) [\cos(\phi_i - \phi_f) + 1] (a_i a_f^{\dagger 2} a_f + a_i^\dagger a_f^\dagger a_i^2 + a_i^\dagger a_i^2 a_f^\dagger + a_i^2 a_i a_f^\dagger) \left. \right\} \\
& - \frac{D}{2} \sum_i \left\{ 5\gamma(1-\gamma)(a_i^\dagger a_i^3 + a_i^{\dagger 3} a_i) \cos 2\phi_i \right. \\
& + \left. \left(35\gamma - \frac{55\gamma^2}{2} - \frac{5}{2} + 1 \right) a_i^{\dagger 2} a_i^2 \cos 2\phi_i \right\} \quad (\text{II.15})
\end{aligned}$$

O termo constante E_0 é exatamente o mesmo obtido no capítulo anterior quando estudamos os campos críticos na temperatura zero.

Os termos contendo dois operadores de desvio de spin, quando levados nas equações de movimento, dão o espectro de ondas de spin a $T = 0$. Quando incluímos os termos com quatro operadores nas equações de movimento, devido às aproximações realizadas para desacoplar essas equações, obtemos um espectro de energia re-normalizada, ou seja, dependente da temperatura.

Os termos contendo um e três operadores são iguais a zero, não contribuindo para o espectro de frequências. Isto segue da minimização da energia do sistema em função do ângulo ϕ_i , ou seja,

$$\begin{aligned}
\frac{2E_0}{2\phi_l} = & J_0 S^2 \sum_{l'} \sin(\phi_l - \phi_{l'}) + J_1 S^2 \sum_g \sin(\phi_l - \phi_g) \\
& + J_2 S^2 \sum_f \sin(\phi_l - \phi_f) + D S (S - \frac{1}{2}) \sin 2\phi_l \\
& - g \mu_B H S \cos \phi_l = 0
\end{aligned} \tag{II.16}$$

Quando trocamos l' por l e $\sin(\phi_{l'} - \phi_l) = -\sin(\phi_l - \phi_{l'})$, no termo linear dado por (II.12), ficamos com:

$$\begin{aligned}
\mathcal{K}_1 = & \left(\frac{S}{2}\right)^{1/2} \sum_l \left\{ J_0 S \sum_{l'} \sin(\phi_l - \phi_{l'}) + J_1 S \sum_g \sin(\phi_l - \phi_g) \right. \\
& + J_2 S \sum_f \sin(\phi_l - \phi_f) \\
& + D \left(S - \frac{1}{2}\right) \sin 2\phi_l \\
& \left. - g \mu_B H \cos \phi_l \right\} (a_l + a_l^\dagger)
\end{aligned}$$

Voltando em (II.16) vemos que \mathcal{K}_1 é igual a zero.

Quando levamos em conta os termos cúbicos do hamiltoniano (II.10), o ângulo de equilíbrio dos spins ϕ_l será renormalizado, ou seja, dependente da temperatura, e \mathcal{K}_3 dará também uma contribuição nula. Isto é semelhante ao que ocorre na fase spin-flop de um antiferromagneto⁹.

CAPÍTULO III

Fase Paramagnética

Na fase paramagnética todos os spins apontam na direção do campo. Neste caso devemos colocar $\phi_\ell = \frac{\pi}{2}$ em (II.10) , ficando com:

$$\begin{aligned}
 \chi^{\text{par}} = & - \frac{J_0}{2} \sum_{\ell\ell'} \left\{ S^2 + S(a_{\ell}^+ a_{\ell'} + a_{\ell'}^+ a_{\ell}) - S(a_{\ell}^+ a_{\ell'} + a_{\ell'}^+ a_{\ell}) \right\} \\
 & - \frac{J_1}{2} \sum_{\ell g} \left\{ S^2 + S(a_g^+ a_{\ell} + a_{\ell}^+ a_g) - S(a_g^+ a_g + a_{\ell}^+ a_{\ell}) \right\} \\
 & - \frac{J_2}{2} \sum_{\ell f} \left\{ S^2 + S(a_f^+ a_{\ell} + a_{\ell}^+ a_f) - S(a_f^+ a_f + a_{\ell}^+ a_{\ell}) \right\} \\
 & - \frac{D}{2} \sum_{\ell} \left\{ \left(\frac{S}{2} - S^2 \right) + \frac{S}{2} (a_{\ell}^2 + a_{\ell}^{+2}) + (S^2 + 2S - 1) a_{\ell}^+ a_{\ell} \right\} \\
 & - g\mu_B H \sum_{\ell} \left\{ S \sin \phi_{\ell} + \left(\frac{S}{2} \right)^{1/2} (a_{\ell} + a_{\ell}^+) \cos \phi_{\ell} \right. \\
 & \quad \left. - a_{\ell}^+ a_{\ell} \sin \phi_{\ell} \right\}
 \end{aligned}
 \tag{III.1}$$

Usando as transformadas de Fourier:

$$\begin{aligned}
 a_{\ell} &= N^{-1/2} \sum_{\vec{q}} a_{\vec{q}} e^{i \vec{q} \cdot \vec{R}_{\ell}} \\
 a_{\ell}^+ &= N^{-1/2} \sum_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^+ e^{-i \vec{q} \cdot \vec{R}_{\ell}}
 \end{aligned}
 \tag{III.2}$$

no hamiltoniano (III.1) e fazendo uso das seguintes propriedades,

válidas para vetores de onda \vec{q} na zona de Brillouin:

$$\sum_l e^{-i(\vec{q} - \vec{q}') \cdot \vec{R}_l} = N \delta_{\vec{q}, \vec{q}'}$$

$$\sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{a}} = z_0 \gamma_{\vec{q}}$$

termos do tipo $\sum_{ll'} a_{l'}^+ a_l$, tornam-se:

$$\sum_{ll'} a_{l'}^+ a_l = N^{-1} \sum_{l'} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{q}'} a_{\vec{q}}^+ a_{\vec{q}'} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{R}_{l'}} e^{i\vec{q}' \cdot \vec{R}_l}$$

Para primeiros vizinhos no plano, $\vec{R}_{l'} = \vec{R}_l + \vec{a}$, como pode ser visto da figura I.2. Assim:

$$\begin{aligned} \sum_{ll'} a_{l'}^+ a_l &= N^{-1} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{q}'} a_{\vec{q}}^+ a_{\vec{q}'} \sum_l e^{-i(\vec{q} - \vec{q}') \cdot \vec{R}_l} \sum_{\vec{q}} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{a}} \\ &= N^{-1} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{q}'} a_{\vec{q}}^+ a_{\vec{q}'} N \delta_{\vec{q}, \vec{q}'} z_0 \gamma_{\vec{q}} \\ &= z_0 \sum_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^+ a_{\vec{q}} \gamma_{\vec{q}} \end{aligned}$$

De forma análoga, para primeiros e segundos vizinhos na direção z , temos:

$$\sum_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{q}} = z_1 \sum_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{q}} \gamma'_{\vec{q}}$$

$$\sum_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{q}} = z_2 \sum_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{q}} \gamma''_{\vec{q}}$$

Fazendo o mesmo para os outros termos, obtemos o seguinte hamiltoniano:

$$\mathcal{H}^{\text{Par}} = E_0^{\text{Par}} + \mathcal{H}_2 + \mathcal{H}_4 \quad (\text{III.3})$$

onde E_0 é o termo constante e \mathcal{H}_2 e \mathcal{H}_4 são os termos contendo dois e quatro operadores de ondas de spin, respectivamente.

$$E_0^{\text{Par}} = - \frac{NS^2}{2} J(0) + \frac{0NS}{2} (S - \frac{1}{2}) - g u_0 HNS \quad (\text{III.4})$$

$$\mathcal{H}_2 = - \sum_{\vec{q}} \left[A_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{q}} + B (a_{\vec{q}} a_{-\vec{q}} + a_{\vec{q}}^{\dagger} a_{-\vec{q}}^{\dagger}) \right] \quad (\text{III.5})$$

$$\mathcal{H}_4 = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \sum_{\vec{q}'} \sum_{\vec{q}''} \left[C_{\vec{q}, \vec{q}', \vec{q}''} a_{\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{q}'}^{\dagger} a_{\vec{q}''} a_{\vec{q}+\vec{q}'+\vec{q}''} \right. \\ \left. + N (a_{\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{q}'}^{\dagger} a_{\vec{q}''} a_{\vec{q}-\vec{q}'-\vec{q}''} + a_{\vec{q}}^{\dagger} a_{\vec{q}'}^{\dagger} a_{\vec{q}''}^{\dagger} a_{\vec{q}+\vec{q}'+\vec{q}''}) \right] \quad (\text{III.6})$$

onde:

$$A_{\vec{q}} = S [J(\vec{q}) - J(0)] + \frac{0}{2} (S^2 + 2S - 1) - g u_0 H \quad (\text{III.7})$$

$$B = \frac{0.5\zeta}{4} \quad (\text{III.8})$$

$$C_{q,q',q''} = \frac{1}{2} \left\{ 2.5(1-\zeta) [J(q+q'-q'') + J(q)] - J(q'-q'') + 0 \left(3.5\zeta - \frac{5.5\zeta^2}{2} - \frac{5}{2} + 1 \right) \right\} \quad (\text{III.9})$$

$$N = \frac{0.5\zeta}{2} (1 - \zeta) \quad (\text{III.10})$$

N é o número de pontos da rede.

Lembramos que nas equações acima, por simplicidade de notação, omitimos a notação vetorial, ou seja, q na realidade representa o vetor de onda \vec{q} . Essa notação será mantida adiante, sempre que não houver possibilidade de confusão.

1. Aproximação Independente da Temperatura

Na aproximação independente da temperatura devemos excluir do hamiltoniano (III.3) os termos contendo quatro operadores. Neste caso, temos que:

$$\mathcal{H}^{\text{Par}} = E_0^{\text{Par}} + \mathcal{H}_2 \quad (\text{III.11})$$

Escrevendo-se as equações de movimento na represen

tação de Heisenberg, $i\hbar \left(\frac{dA}{dt}\right) = [A, \mathcal{H}]$, para os operadores a_q^+ e a_q , do hamiltoniano dado em (III.11) e fazendo uso das relações de comutação:

$$[a_q, a_{q'}^+] = \delta_{q, q'} \quad (\text{III.12a})$$

$$[a_q, a_{q'}] = [a_q^+, a_{q'}^+] = 0$$

e da seguinte propriedade, válida para quaisquer três operadores A, B, C ,

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C] \quad (\text{III.12b})$$

obtemos as equações de movimento:

$$i\hbar \frac{da_q}{dt} = [a_q, \mathcal{H}^{\text{per}}] = -A_q a_q - 2B a_{-q}^+ \quad (\text{III.13})$$

$$i\hbar \frac{da_{-q}^+}{dt} = [a_{-q}^+, \mathcal{H}^{\text{per}}] = A_q a_{-q}^+ + 2B a_q$$

Colocando-se $\dot{a}_q = -i\omega_q a_q$ e $\dot{a}_{-q}^+ = -i\omega_q a_{-q}^+$, encontramos o seguinte sistema de equações:

$$(\hbar \omega_{\mathbf{q}} + A_{\mathbf{q}}) a_{\mathbf{q}} + 2 B a_{-\mathbf{q}}^{\dagger} = 0$$

(III.14)

$$-2 B a_{\mathbf{q}} + (\hbar \omega_{\mathbf{q}} - A_{\mathbf{q}}) a_{-\mathbf{q}}^{\dagger} = 0$$

que nos dá o espectro de energia dos magnons na fase paramagnética:

$$\hbar \omega_{\mathbf{q}} (T=0, H) = [A_{\mathbf{q}}^2 - 4 B^2]^{1/2} \quad (\text{III.15})$$

Minimizando-se a (III.15) encontramos que o ponto de mínimo da frequência ocorre em $\mathbf{q}^* = (q_x = 0, q_y = 0, \cos q_z c = -J_1/4J_2)$. Na figura III.1 mostramos o espectro de frequências na fase paramagnética em função do vetor de onda na direção z.

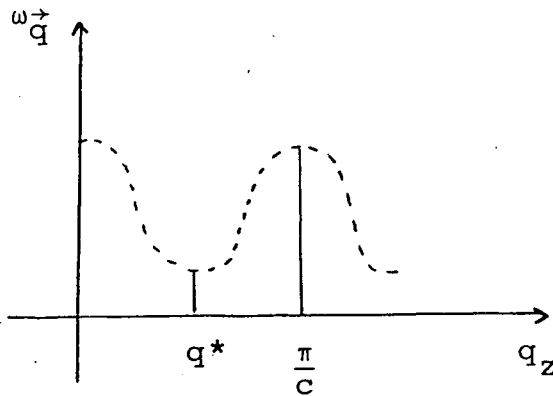


Figura III.1 - Espectro de frequências na fase paramagnética em função do vetor de onda na direção z. O vetor de onda \mathbf{q}^* é dado por $q_x = q_y = 0$ e $\cos q_z c = -J_1/4J_2$.

Ao diminuirmos o campo a partir da fase paramagnética, a frequência se anula inicialmente nos pontos de mínimo q^* . Isto ocorre num campo crítico tal que:

$$A_{q^*} = -2B \quad (\text{III.16})$$

No ponto de mínimo q^* , A_q é dado por:

$$A_{q^*} = -S \left[\frac{J_1^2}{4J_2} + 2J_1 + 4J_2 \right] + \frac{0}{2}(5\zeta^2 + 2S - 1) - g\mu_B H^{P-F} \quad (\text{III.17})$$

onde H^{P-F} é o campo da transição paramagnética-fan.

É interessante observar que o mínimo da frequência ocorre para o vetor de onda que descreve um arranjo helicoidal (Capítulo I). Esta é uma situação análoga àquela que ocorre para um antiferromagneto, para o qual o mínimo da frequência ocorre nos vértices da zona de Brillouin¹⁰, que é o vetor que caracteriza um ordenamento antiferromagnético.

Quando substituímos (III.17) em (III.16) encontramos o campo da transição paramagnética-fan a $T = 0$:

$$g\mu_B H^{P-F}(T=0) = -S \left[\frac{J_1^2}{4J_2} + 2J_1 + 4J_2 \right] + \frac{0}{2}(5\zeta^2 + 5\zeta + 2S - 1) \quad (\text{III.18})$$

O campo a $T = 0$ não depende de J_0 , pois a interação no plano não muda com o campo magnético aplicado, pois todos

os spins de um mesmo plano giram do mesmo ângulo, quando por exemplo, aumentamos o campo magnético desde zero até H^{P-F} ($T = 0$).

2. Diagonalização do Hamiltoniano

Vamos escrever o hamiltoniano (III.11) em termos de novos operadores c_q^+ c_q , tal que o novo hamiltoniano seja agora diagonal. Tomando-se a seguinte transformação canônica entre os velhos e novos operadores:

$$a_q = u_q c_q - v_q c_{-q}^+ \quad (\text{III.19})$$

$$a_{-q}^+ = u_q c_{-q}^+ - v_q c_q$$

onde a relação de comutação $[a_q, a_q^+] = 1$ é preservada, isto é,

$$[c_q, c_q^+] = 1 \quad e$$

$$u_q^2 - v_q^2 = 1 \quad , \quad (\text{III.20})$$

obtemos o seguinte hamiltoniano:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} = \sum_{\vec{q}} \left\{ A_{\vec{q}} \left[u_{\vec{q}}^2 c_{\vec{q}}^{\dagger} c_{\vec{q}} + v_{\vec{q}}^2 (1 + c_{-\vec{q}}^{\dagger} c_{-\vec{q}}) \right. \right. \\
 \left. \left. + u_{\vec{q}} v_{\vec{q}} (c_{\vec{q}}^{\dagger} c_{-\vec{q}}^{\dagger} + c_{-\vec{q}} c_{\vec{q}}) \right] \right. \\
 + B \left[u_{\vec{q}}^2 c_{\vec{q}} c_{-\vec{q}} - u_{\vec{q}} v_{\vec{q}} (1 + c_{\vec{q}}^{\dagger} c_{\vec{q}}) \right. \\
 - u_{\vec{q}} v_{\vec{q}} c_{-\vec{q}}^{\dagger} c_{-\vec{q}} + v_{\vec{q}}^2 c_{-\vec{q}}^{\dagger} c_{\vec{q}}^{\dagger} + u_{\vec{q}}^2 c_{\vec{q}}^{\dagger} c_{-\vec{q}}^{\dagger} \\
 \left. \left. - u_{\vec{q}} v_{\vec{q}} c_{\vec{q}}^{\dagger} c_{\vec{q}} - u_{\vec{q}} v_{\vec{q}} (1 + c_{-\vec{q}}^{\dagger} c_{-\vec{q}}) + v_{\vec{q}}^2 c_{-\vec{q}} c_{\vec{q}} \right] \right\} \quad (\text{III.21})
 \end{aligned}$$

Impondo-se que os termos fora da diagonal desapare

cem:

$$- A_{\vec{q}} u_{\vec{q}} v_{\vec{q}} + B(u_{\vec{q}}^2 + v_{\vec{q}}^2) = 0 \quad (\text{III.22})$$

e usando (III.20), obtemos:

$$v_{\vec{q}}^2 = -\frac{1}{2} + \frac{A_{\vec{q}}}{2\hbar\omega_{\vec{q}}} \quad (\text{III.23})$$

Na fase paramagnética $A_{\vec{q}}$ é sempre negativo, mesmo na fronteira paramagnética-fan, onde $\vec{q} = \vec{Q}$ e $A_{\vec{Q}} = -2B$. Logo, para todo \vec{q} e $H \geq H^{P-F}$, $A_{\vec{q}} < 0$. Portanto, a única solução que satisfaz (III.23) é:

$$v_{\vec{q}}^2 = -\frac{1}{2} - \frac{A_{\vec{q}}}{2\hbar\omega_{\vec{q}}} \quad , \quad (\text{III.24})$$

onde $|A_{\vec{q}}| > \hbar\omega_{\vec{q}}$.

De (III.20) e (III.24) tiramos que:

$$u_g^2 = \frac{1}{2} - \frac{A_g}{2\hbar\omega_g} \quad e \quad (III.25)$$

$$u_g^2 + v_g^2 = - \frac{A_g}{\hbar\omega_g} \quad (III.26)$$

e da (III.22) é fácil verificar que:

$$u_g v_g = - \frac{B}{\hbar\omega_g} \quad (III.27)$$

Voltando em (III.21), encontramos o seguinte hamiltoniano diagonalizado:

$$\chi_{\text{par}}^{\text{diag}} = E_0 - \sum_g \left[\frac{\hbar\omega_g + A_g}{2} + \hbar\omega_g c_g^+ c_g \right] \quad (III.28)$$

3. Aproximação Dependente da Temperatura

Os efeitos da temperatura e a correção de ponto zero são obtidos quando incluimos nas equações de movimento⁹ os termos de quatro operadores dados pela equação (III.6), isto é:

$$i \hbar \frac{da_k}{dt} = -A_k a_k - 2B a_{-k}^+$$

$$+ \sum_{q, q', q''} C_{q, q', q''} [a_k, a_q^+ a_{q'}^+ a_{q''} a_{q+q'-q''}]$$

$$+ N \sum_{q, q', q''} [a_k, (a_q^+ a_{q'} a_{q''} a_{q-q'-q''} + a_q^+ a_{q'}^+ a_{q''}^+ a_{q+q'+q''})]$$

(III.29)

$$i \hbar \frac{da_{-k}^+}{dt} = A_k a_{-k}^+ + 2B a_k$$

$$+ \sum_{q, q', q''} C_{q, q', q''} [a_{-k}^+, a_q^+ a_{q'}^+ a_{q''} a_{q+q'-q''}]$$

$$+ N \sum_{q, q', q''} [a_{-k}^+, (a_q^+ a_{q'} a_{q''} a_{q-q'-q''} + a_q^+ a_{q'}^+ a_{q''}^+ a_{q+q'+q''})]$$

Com as relações (III.12) as equações acima ficam:

$$i \hbar \frac{da_k}{dt} = -A_k a_k - 2B a_{-k}^+$$

$$+ \sum_{q, q'} (C_{k, q, q'} + C_{q, k, q'}) a_q^+ a_{q'} a_{k+q-q'}$$

$$+ N \sum_{q, q'} a_q a_{q'} a_{k-q-q'} + 3N \sum_{q, q'} a_q^+ a_{q'}^+ a_{k+q+q'}$$

(III.30)

$$i \hbar \frac{da_{-k}^+}{dt} = A_k a_{-k}^+ + 2B a_k$$

$$- \sum_{q, q'} (C_{q, q', -k} + C_{q, q', q+q'+k}) a_q^+ a_{q'}^+ a_{q+q'+k}$$

$$+ 3N \sum_{q, q'} a_q^+ a_{q'} a_{k+q-q'} - N \sum_{q, q'} a_q^+ a_{q'}^+ a_{-k-q-q'}$$

Para desacoplar os termos que dão as interações entre as ondas de spin, linearizamos essas equações através da aproximação RPA¹¹ e utilizamos a transformação canônica (III.19) que diagonaliza \mathcal{H}_2 . A aproximação RPA consiste em tomar a seguinte média para o produto dos três operadores:

$$\langle a_q a_{q'} a_{q''} \rangle = \langle a_q a_{q'} \rangle a_{q''} + \langle a_q a_{q''} \rangle a_{q'} + \langle a_{q'} a_{q''} \rangle a_q$$

Também são válidas as seguintes relações:

$$\langle c_{-q}^+ c_{-q} \rangle = \langle c_q^+ c_q \rangle ,$$

$$\langle c_q^+ c_{q'}^+ \rangle = \langle c_q c_{q'} \rangle ,$$

$$\langle c_q^+ c_{q'} \rangle \text{ e } \langle c_q c_{q'}^+ \rangle \text{ s\~{o} s\~{a}o diferentes de zero se } q = q'.$$

É claro que:

$$\langle c_q c_q^+ \rangle = 1 + \langle c_q^+ c_q \rangle$$

Não mostraremos aqui todos os cálculos para desacoplar as equações (III.30), uma vez que estes cálculos são bastante extensos. Vamos apenas dar um exemplo, tomando um termo particular dessas equações, para exhibir o procedimento utilizado.

Consideraremos o segundo termo da segunda equação dada em (III.30) que contém três operadores de criação e destruição de ondas de spin:

$$\begin{aligned}
& \sum_{q, q'} C_{q, q', -k} a_q^+ a_{q'}^+ a_{q+q'+k} = \\
& \sum_{q, q'} C_{q, q', -k} \left[\langle a_q^+ a_{q'}^+ \rangle a_{q+q'+k} + \langle a_q^+ a_{q+q'+k} \rangle a_{q'}^+ \right. \\
& \left. + \langle a_{q'}^+ a_{q+q'+k} \rangle a_q^+ \right] = - \sum_q C_{q, -q, -k} \left[u_q v_q + 2 u_q v_q \langle c_q^+ c_q \rangle \right] a_k \\
& + \sum_q (C_{q, -k, -k} + C_{-k, q, -k}) \left[v_q^2 + (u_q^2 + v_q^2) \langle c_q^+ c_q \rangle \right] a_{-k}^+ .
\end{aligned}$$

Com isso as equações de movimento (III.30) ficam:

$$i \hbar \dot{a}_k = (-A_k + C_k) a_k + (-2B + D_k) a_{-k}^+ \quad (\text{III.31})$$

$$i \hbar \dot{a}_{-k}^+ = (2B - D_k) a_k + (A_k - C_k) a_{-k}^+$$

onde:

$$\begin{aligned}
C_k = \frac{1}{N} \sum_q \left\{ (C_{k, q, q} + C_{k, q, k} + C_{q, k, q} + C_{q, k, k}) \left[v_q^2 + \right. \right. \\
\left. \left. (u_q^2 + v_q^2) \langle c_q^+ c_q \rangle \right] - 6 u_q v_q \left[u_q v_q + \right. \right. \\
\left. \left. 2 u_q v_q \langle c_q^+ c_q \rangle \right] \right\}
\end{aligned} \quad (\text{III.32})$$

$$\begin{aligned}
N_k = \frac{1}{N} \sum_q \left\{ - (C_{k,-k,q} + C_{-k,k,q}) u_q v_q \right. \\
\left. + 2 u_q v_q \langle c_q^\dagger c_q \rangle \right] + 6 N [v_q^2 + \\
(u_q^2 + v_q^2) \langle c_q^\dagger c_q \rangle] \} \quad (\text{III.33})
\end{aligned}$$

e A_k e B já foram definidos em (III.7) e (III.8). Vale lembrar que na obtenção das equações (III.31) usamos a seguinte propriedade de simetria:

$$\sum_q J(q-k) f(q) = \sum_q J(k+q) f(q),$$

onde $f(q)$ é uma função par do vetor de onda.

Escrevendo-se que $\dot{a}_k = -i\omega_k a_k$ e $\dot{a}_{-k}^+ = -i\omega_k a_{-k}^+$ obtemos o espectro de frequência dos magnons renormalizado:

$$\hbar\omega_k(T, H) = \left[(A_k - C_k)^2 - (2B - D_k)^2 \right]^{1/2} \quad (\text{III.34})$$

Esta frequência torna-se nula no ponto $k^* = (k_x=0, k_y=0, \cos k_z c = -J_1/4J_2)$, que é o ponto de mínimo da frequência para cada valor do campo magnético, isto é,

$$(A_{k^*} - C_{k^*}) = - (2B - D_{k^*})$$

Substituindo-se os valores de A_k , C_k e D_k dados pe

las equações (III.7), (III.32) e (III.33) no ponto de mínimo k^* , obtemos que:

$$H^{P-F}(T) = H^{P-F}(0) - \Delta H^{P-F}(0) - \Delta H^{P-F}(T) \quad (\text{III.35})$$

onde $H^{P-F}(0)$ é o campo da transição paramagnética-fan a $T = 0$, $\Delta H^{P-F}(0)$ é uma pequena correção do ponto zero¹² e $\Delta H^{P-F}(T)$ representa uma correção dependente da temperatura. Temos então que:

$$H^{P-F}(0) = -J \left[\frac{J_1^2}{4J_2} + 2J_1 + 4J_2 \right] + \frac{D}{2} (J_1^2 + J_1 + 2J_2 - 1) \quad (\text{III.36})$$

$$\begin{aligned} \Delta H^{P-F}(0) = & \frac{1}{N} \sum_q (C_{k^*, q, q} + C_{k^*, q, k^*} + C_{q, k^*, q} + C_{q, k^*, k^*} + 6N) v_q^2 \\ & - \frac{1}{N} \sum_q (C_{k^*, -k^*, q} + C_{-k^*, k^*, q} + 6N) u_q v_q \end{aligned} \quad (\text{III.37})$$

$$\Delta H^{P-F}(T) = \frac{1}{N} \sum_q f(q) \langle C_q^\dagger C_q \rangle = \frac{1}{N} \sum_q \frac{f(q)}{e^{\beta \hbar \omega_q} - 1} \quad (\text{III.38})$$

onde omitimos o fator $g\mu_0$ e

$$\begin{aligned} f(q) = & [(C_{k^*, q, q} + C_{k^*, q, k^*} + C_{q, k^*, q} + C_{q, k^*, k^*} + 6N)(u_q^2 + v_q^2) \\ & - (C_{k^*, -k^*, q} + C_{-k^*, k^*, q} + 6N)2u_q v_q] \end{aligned} \quad (\text{III.39})$$

Nós estamos interessados principalmente na correção dependente da temperatura. A principal contribuição para $\Delta H^{P-F}(T)$ vem dos vetores de onda que estão próximos ao ponto de mínimo k_z^{*12} , no qual a frequência é nula. Considerando-se isso, vamos expandir A_k em torno de k^* para encontrar o termo que mais contribui para a frequência:

$$A_k = -S \left[\frac{J_1^2}{4J_2} + 2J_1 + 4J_2 \right] + \frac{D}{2} (S^2 + 2S - 1) - g\mu_B H^{P-F}(0) \\ - SJ_0 a^2 (k_x^2 + k_y^2) + \left(4SJ_2 c^2 - \frac{SJ_1^2 c^2}{4J_2} \right) (k_z - k_z^*)^2, \quad (\text{III.40})$$

onde $k_z^* = \arccos \left(\frac{-J_1}{4J_2} \right)$.

Substituindo $g\mu_B H^{P-F}(0)$ da equação (III.18) em (III.40), obtemos:

$$A_k \Big|_{H^{P-F}(0)} = -2B - SJ_0 a^2 (k_x^2 + k_y^2) \\ + \left(4SJ_2 c^2 - \frac{SJ_1^2 c^2}{4J_2} \right) (k_z - k_z^*)^2, \quad (\text{III.41})$$

que é a expansão de A_k em torno do ponto de mínimo quando o campo magnético é igual ao campo da transição paramagnética-fan.

Levando-se a (III.41) na (III.15), obtemos a expansão de $\hbar\omega_k$ em torno do ponto de mínimo.

$$\hbar\omega_k \Big|_{H^{P-F}(0)} = 2B^{1/2} \left\{ SJ_0 a^2 (k_x^2 + k_y^2) \right. \\ \left. + \left(4S|J_2|c^2 - \frac{SJ_1^2 c^2}{4|J_2|} \right) (k_z - k_z^*)^2 \right\}^{1/2} \quad (\text{III.42})$$

Substituindo-se as equações (III.26) e (III.27) em (III.39), ficamos com:

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} f(\vec{q}) \langle c_{\vec{q}}^{\dagger} c_{\vec{q}} \rangle = \\
 & = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \left[- \left(c_{\vec{k}^*, \vec{q}, \vec{q}} + c_{\vec{k}^*, \vec{q}, \vec{k}^*} + c_{\vec{q}, \vec{k}^*, \vec{q}} + c_{\vec{q}, \vec{k}^*, \vec{k}^*} + 6\hbar \right) \frac{A_{\vec{q}}}{\hbar \omega_{\vec{q}}} \right. \\
 & \left. + \left(c_{\vec{k}^*, -\vec{k}^*, \vec{q}} + c_{-\vec{k}^*, \vec{k}^*, \vec{q}} + 6\hbar \right) \frac{2B}{\hbar \omega_{\vec{q}}} \right] \langle c_{\vec{q}}^{\dagger} c_{\vec{q}} \rangle \quad (\text{III.43})
 \end{aligned}$$

Como as maiores contribuições à esta soma vem dos valores de \vec{q} que são próximos do ponto de mínimo da energia, ou seja, \vec{q}^* , vamos tomar os valores de $c_{\vec{q}, \vec{q}', \vec{q}''}$ e $A_{\vec{q}}$ dados pelas equações (III.9) e (III.7) no ponto de mínimo quando o campo magnético é igual ao campo da transição paramagnética-fan. Assim, teremos:

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} f(\vec{q}) \langle c_{\vec{q}}^{\dagger} c_{\vec{q}} \rangle = \\
 & = \frac{4B}{N} \left[125(1-\gamma) J(Q) - 2J(0) - J(2Q) \right. \\
 & \left. + 3D \left(55\gamma - \frac{95\gamma^2}{2} - \frac{5}{2} + 1 \right) \right] \sum_{\vec{q}} \frac{\langle c_{\vec{q}}^{\dagger} c_{\vec{q}} \rangle}{\hbar \omega_{\vec{q}}} \quad (\text{III.44})
 \end{aligned}$$

onde \vec{k}^* foi substituído por \vec{Q} , uma vez que o ponto de mínimo da frequência ocorre para o vetor de onda \vec{Q} , que descreve um arranjo helicoidal (Capítulo I).

Fazendo-se uma mudança de variáveis, onde:

$$u_x = (5 J_0 a^2)^{1/2} q_x ,$$

$$u_y = (5 J_0 a^2)^{1/2} q_y ,$$

(III.45)

$$u_z = \left[45 |J_2| c^2 - \frac{5 J_1^2 c^2}{4 |J_2|} \right]^{1/2} (q_z - q_z^*)$$

$$\text{e} \quad q_z^* = \arccos \left(-\frac{J_1}{4 J_2} \right) ,$$

o que equivale a deslocar o ponto de mínimo q^* para a origem, a equação (III.42) torna-se:

$$\hbar \omega_u \Big|_{H^{P-F}(0)} = 2 B^{1/2} (u_x^2 + u_y^2 + u_z^2)^{1/2} = 2 B^{1/2} u \quad (\text{III.46})$$

Com esta mudança de variáveis a equação (III.44) fica:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{N} \sum_q f(q) \langle c_q^\dagger c_q \rangle = \\ & = \frac{4B}{N} [125(1-\zeta) J(0) - J(2a) - 2J(0) \\ & + 30 \left(55\zeta - \frac{5}{2} + 1 - \frac{95\zeta^2}{2} \right)] \sum_u \frac{1}{\hbar \omega_u (e^{\beta \hbar \omega_u} - 1)} \end{aligned} \quad (\text{III.47})$$

Trocando-se o somatório por uma integral e usando-se a (III.46), obtemos:

$$\frac{1}{2B^{1/2}} \sum_u \frac{1}{u(e^{2\beta B^{1/2}u} - 1)} = \frac{V}{2B^{1/2} 8\pi^3} \int_0^\infty \frac{1}{u(e^{\beta B^{1/2}u} - 1)} d^3\vec{u} =$$

$$\frac{1}{2B^{1/2}} \frac{N}{2\pi^3} \frac{1}{5J_0 \left[4S|J_2| - \frac{5J_1^2}{4|J_2|} \right]^{1/2}} \int_0^\infty \frac{u du}{e^{2\beta B^{1/2}u} - 1}, \quad (\text{III.48})$$

onde $SJ_0 \left[4S|J_2| - \frac{5J_1^2}{4|J_2|} \right]^{1/2}$ vem da mudança de variáveis feita em (III.45). Observe que estamos considerando um íon por célula unitária, ou seja, $\frac{V}{abc} = N$.

Integrando-se a (III.48) em coordenadas esféricas e fazendo-se uma simples mudança de variável, encontramos que:

$$\frac{1}{2B^{1/2}} \frac{N}{2\pi^3} \frac{1}{5J_0 \left[4S|J_2| - \frac{5J_1^2}{4|J_2|} \right]^{1/2}} \int_0^\infty \frac{u du}{e^{2\beta B^{1/2}u} - 1} =$$

$$\frac{1}{2B^{1/2}} \frac{N}{485 J_0 B \left[4S|J_2| - \frac{5J_1^2}{4|J_2|} \right]^{1/2}} (kT)^2.$$

Quando levamos este resultado em (III.47) e (III.35) obtemos o campo da transição paramagnética-fan dependente da temperatura:

$$H^{P-F}(T) = H^{P-F}(0) - \Delta H^{P-F}(0)$$

$$- \frac{[125(1-\xi)J(Q) + 30(55\xi - \frac{95\xi^2}{2} - \frac{5}{2} + 1) - 2J(0) - J(2Q)]}{12g\mu_B(0s^3\xi)^{1/2} J_0 \left[4S|J_2| - \frac{5J_1^2}{4|J_2|} \right]^{1/2}} (kT)^2$$

$$- O(T^4), \quad (\text{III.49})$$

o que mostra que em primeira aproximação a correção é quadrática com a temperatura.

A dependência assintótica T^2 para o campo crítico já era esperada, uma vez que o hamiltoniano apresenta operadores do tipo $a_q a_{-q}$ e $a_q^+ a_{-q}^+$ em \mathcal{H}_2 .

Experimentalmente não encontramos na literatura dados para testar a expressão (III.49). As medidas mais recentes para o MnP estão concentradas nas vizinhanças do ponto de Lifshitz², que ocorre numa região de temperaturas acima do regime de baixas temperaturas que estamos considerando neste trabalho.

CAPÍTULO IV

Fase Fan

Vimos no Capítulo I que na fase fan os vetores de spin variam senoidalmente de plano para plano. A amplitude desta oscilação vai diminuindo à medida que o campo magnético aplicado se aproxima do campo da transição fan-paramagnética. Quando atingirmos este campo de transição a amplitude de oscilação vai a zero e os spins se encontram alinhados com o campo.

Vamos assumir aqui uma aproximação na qual a amplitude de oscilação é pequena, válida apenas para campos um pouco menores que o da transição fan-paramagnética. Portanto a equação (I.10), para valores de $\delta \ll 1$, reduz-se a:

$$\sin 2\phi_i = 2 \int \sin \vec{Q} \cdot \vec{R}_i \quad (\text{IV.1})$$

Levando-se a equação (IV.1) na equação (II.10), e considerando-se apenas termos com até dois operadores, obtemos o seguinte hamiltoniano, escrito em função das transformadas de Fourier (III.1):

$$\mathcal{H}^{\text{fan}} = E_0^{\text{fan}} + \mathcal{H}_2 - \int^2 \mathcal{H}_2' \quad (\text{IV.2})$$

onde E_0^{fan} é o termo constante, e \mathcal{H}_2 e \mathcal{H}_2' são os termos quadráticos nos operadores de criação e destruição de ondas de spin. Te

mos então que:

$$\begin{aligned}
 E_o^{\text{Fan}} = & -\frac{J_0}{2} \sum_{i'} \left\{ S^2 \left[\kappa^2 \sin(\vec{Q} \cdot \vec{R}_i) \sin(\vec{Q} \cdot \vec{R}_{i'}) + 1 \right. \right. \\
 & \left. \left. - \frac{\kappa^2}{2} \sin^2(\vec{Q} \cdot \vec{R}_i) - \frac{\kappa^2}{2} \sin^2(\vec{Q} \cdot \vec{R}_{i'}) \right] \right\} \\
 & - \frac{J_1}{2} \sum_{i'g} \left\{ S^2 \left[\kappa^2 \sin(\vec{Q} \cdot \vec{R}_i) \sin(\vec{Q} \cdot \vec{R}_g) + 1 \right. \right. \\
 & \left. \left. - \frac{\kappa^2}{2} \sin^2(\vec{Q} \cdot \vec{R}_i) - \frac{\kappa^2}{2} \sin^2(\vec{Q} \cdot \vec{R}_g) \right] \right\} \\
 & - \frac{J_2}{2} \sum_{if} \left\{ S^2 \left[\kappa^2 \sin(\vec{Q} \cdot \vec{R}_i) \sin(\vec{Q} \cdot \vec{R}_f) + 1 \right. \right. \\
 & \left. \left. - \frac{\kappa^2}{2} \sin^2(\vec{Q} \cdot \vec{R}_i) - \frac{\kappa^2}{2} \sin^2(\vec{Q} \cdot \vec{R}_f) \right] \right\} \\
 & - \frac{DS}{2} \left(S - \frac{1}{2} \right) \sum_i (2\kappa^2 \sin^2 \vec{Q} \cdot \vec{R}_i - 1) \\
 & - g\mu_0 H S \sum_i \left(1 - \frac{\kappa^2}{2} \sin^2 \vec{Q} \cdot \vec{R}_i \right)
 \end{aligned} \tag{IV.3}$$

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_2 = & - \sum_q \left\{ S [J(q) - J(0)] + \frac{D}{2} (S^2 + 2S - 1) - g\mu_0 H \right\} a_q^\dagger a_q \\
 & - \frac{DS}{4} \sum_q (a_q a_{-q} + a_q^\dagger a_{-q}^\dagger)
 \end{aligned} \tag{IV.4}$$

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_2' = & \frac{S}{8} \sum_q (a_q a_{q-2Q} + a_q^\dagger a_{q-2Q}^\dagger) \left[\frac{J(-2Q-q)}{2} - \frac{J(-q-Q)}{2} + D \right] \\
 & + \frac{S}{8} \sum_q (a_q^\dagger a_{2Q-q}^\dagger + a_q a_{2Q-q}) \left[\frac{J(2Q-q)}{2} - \frac{J(Q-q)}{2} + D \right] \\
 & + \frac{1}{8} \sum_q a_q^\dagger a_{q-2Q} \left\{ S \left[\frac{J(q)}{2} + \frac{J(q-2Q)}{2} + 2J(Q) \right. \right. \\
 & \left. \left. - J(q-Q) - J(2Q) - J(0) \right] + 2D(S^2 + 2S - 1) + g\mu_0 H \right\} \\
 & + \frac{1}{8} \sum_q a_q^\dagger a_{q+2Q} \left\{ S \left[-J(q+Q) + \frac{J(q)}{2} + \frac{J(q+2Q)}{2} \right. \right. \\
 & \left. \left. + 2J(Q) - J(2Q) - J(0) \right] + 2D(S^2 + 2S - 1) + g\mu_0 H \right\} \\
 & + \sum_q \alpha_q a_q^\dagger a_q + \sum_q \beta_q (a_q a_{-q} + a_q^\dagger a_{-q}^\dagger)
 \end{aligned}$$

(IV.5)

onde:

$$\alpha_q = \frac{S}{8} [J(q+Q) - 2J(q) + J(q-Q) - 4J(Q) + 4J(0)] - \frac{D}{2} (S^2 + 2S - 1) + \frac{g\mu_0 H}{4} \quad (\text{IV.6a})$$

$$\beta_q = \frac{S}{16} [J(Q+q) + J(Q-q) - 2J(q)] - \frac{DS}{4} \quad (\text{IV.6b})$$

Para encontrar o campo magnético que dá a posição de equilíbrio dos spins na fase fan para cada valor de δ , seria preciso considerar termos de maior ordem em δ na (IV.1). Se fizéssemos isso encontraríamos uma expressão semelhante àquela determinada na equação (I.15) na qual o valor de δ depende do campo magnético.

Para determinar o espectro de energia é necessário escrever as equações de movimento para os operadores de ondas de spin. Isto, no entanto, leva a um sistema com infinitas equações acopladas. Contudo, como δ é pequeno, podemos considerar \mathcal{H}_2 como sendo um hamiltoniano não perturbado e \mathcal{H}'_2 como uma perturbação.

A correção em primeira ordem para o espectro, é dada pela teoria de perturbação¹³ por: $\langle n_q | \mathcal{H}'_2 | n_q \rangle$. A perturbação em segunda ordem não será considerada, pois leva a termos de quarta ordem em δ . Precisamos, portanto, considerar apenas os termos da diagonal em \mathcal{H}'_2 , ou seja,

$$\mathcal{H}'_2 = \sum_q [\alpha_q a_q^\dagger a_q + \beta_q (a_q a_{-q} + a_q^\dagger a_{-q}^\dagger)] \quad (\text{IV.7})$$

Calculando-se agora as equações de movimento de Heisenberg para o hamiltoniano (IV.2), usando a (IV.7) no lugar da (IV.5), obtemos o seguinte espectro de energia:

$$\hbar \omega_q = \left[(A_q + \delta^2 \alpha_q)^2 - (2B + 2\delta^2 \beta_q)^2 \right]^{1/2} \quad (\text{IV.8})$$

Na transição fan-paramagnética, $\delta = 0$ e a frequência dada em (IV.8) se reduz à (III.9). A transição ocorre no ponto de mínimo $q^* = (q_x^a = 0, q_y^a = 0, q_z^c = \arccos(-J_1/4J_2))$, ou seja, o campo da transição fan-paramagnética coincide com o campo da transição paramagnética-fan, caracterizando uma transição de segunda ordem.

Quando diminuimos o campo magnético a partir de seu valor na transição fan-paramagnética, δ vai aumentando e a nossa aproximação vai deixando de ser válida. Se, no entanto, tentarmos uma extrapolação em direção ao campo da transição fan-hélice, vemos que, conforme diminuimos o campo magnético, o ponto de mínimo $q^* = (0, 0, \cos q_z^c = (-J_1/4J_2))$, vai se aproximando da frequência zero, mas nunca conseguimos determinar o limite de estabilidade dinâmico da fase fan, ou seja, para qualquer campo magnético, abaixo do campo crítico da transição fan-paramagnética, a frequência dos magnons na fase fan é sempre diferente de zero.

CAPÍTULO V

Fase Helicoidal

No capítulo I o arranjo de spins foi descrito por uma hélice $\phi_\ell = \vec{Q} \cdot \vec{R}_\ell$, desprezando as correções devidas à presença do campo e da anisotropia. Vamos considerar agora estas correções e usar a seguinte expansão¹⁴:

$$\phi_\ell = \vec{Q} \cdot \vec{R}_\ell + \delta\phi_\ell^{(1)} + \delta\phi_\ell^{(2)} + \dots \quad (\text{V.1})$$

onde os $\delta\phi_\ell$ representam desvio devido ao campo e à anisotropia. $\delta\phi_\ell^{(1)}$ representa a correção de primeira ordem. Os outros termos são correções de ordem igual ou superior a dois, e não serão considerados nos cálculos.

Para se determinar o valor do ângulo ϕ_ℓ usamos um processo iterativo, substituindo $\phi_\ell = \vec{Q} \cdot \vec{R}_\ell$ nos dois últimos termos da (II.16) e nos primeiros termos $\phi_\ell = \vec{Q} \cdot \vec{R}_\ell + \delta\phi_\ell^{(1)}$, ficando com:

$$\begin{aligned} & \left[J_0 S^2 \sum_{i'} \cos \vec{Q} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_{i'}) + J_1 S^2 \sum_g \cos \vec{Q} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_g) \right. \\ & \left. + J_2 S^2 \sum_f \cos \vec{Q} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_f) \right] \delta\phi_i^{(1)} - J_0 S^2 \sum_{i'} \cos \vec{Q} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_{i'}) \delta\phi_{i'}^{(1)} \\ & - J_1 S^2 \sum_g \cos \vec{Q} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_g) \delta\phi_g^{(1)} - J_2 S^2 \sum_f \cos \vec{Q} \cdot (\vec{R}_i - \vec{R}_f) \delta\phi_f^{(1)} \\ & + D \left(S^2 - \frac{S}{2} \right) \sin 2 \vec{Q} \cdot \vec{R}_i - g \mu_0 H S \cos \vec{Q} \cdot \vec{R}_i = 0 \end{aligned}$$

Avaliando-se as somas em ℓ' , g e f dos coeficientes de $\delta\phi_{\ell}^{(1)}$ e fazendo-se um rearranjo dos termos, obtemos:

$$\begin{aligned}
 S^2 [4J_0 + 2J_1 \cos Q_c + 2J_2 \cos 2Q_c] \delta\phi_{\ell}^{(1)} = \\
 J_0 S^2 \sum_{\ell'} \cos \vec{Q} \cdot (\vec{R}_{\ell} - \vec{R}_{\ell'}) \delta\phi_{\ell'}^{(1)} + J_1 S^2 \sum_g \cos \vec{Q} \cdot (\vec{R}_{\ell} - \vec{R}_g) \delta\phi_g^{(1)} + \\
 J_2 S^2 \sum_f \cos \vec{Q} \cdot (\vec{R}_{\ell} - \vec{R}_f) \delta\phi_f^{(1)} - 0 \left(S^2 - \frac{S}{2} \right) \sin 2\vec{Q} \cdot \vec{R}_{\ell} + \\
 g u_0 HS \cos \vec{Q} \cdot \vec{R}_{\ell} .
 \end{aligned}$$

Escolhendo-se uma solução do tipo:

$$\delta\phi_{\ell}^{(1)} = X \sin 2\vec{Q} \cdot \vec{R}_{\ell} + Y \cos \vec{Q} \cdot \vec{R}_{\ell} \quad (V.2)$$

e calculando-se as somas em ℓ' , g e f , temos que:

$$\begin{aligned}
 & \left\{ \frac{S^2 X}{2} [J(Q) - J(3Q)] + 0 \left(S^2 - \frac{S}{2} \right) \right\} \sin 2\vec{Q} \cdot \vec{R}_{\ell} \\
 & + \left\{ \frac{S^2 Y}{2} [2J(Q) - J(0) - J(2Q)] - g u_0 HS \right\} \cos \vec{Q} \cdot \vec{R}_{\ell} = 0
 \end{aligned}$$

Como a solução deve ser válida para qualquer ℓ , os coeficientes de $\sin(2\vec{Q} \cdot \vec{R}_{\ell})$ e $\cos(\vec{Q} \cdot \vec{R}_{\ell})$ têm que ser iguais a zero, ou seja:

$$X = \frac{20 \left(s^2 - \frac{5}{2} \right)}{(a' - c')} \quad (V.3)$$

$$Y = \frac{2 q_0 H S}{(b' - 2a')}$$

onde:

$$a' = S^2 [J(0) - J(Q)]$$

$$b' = S^2 [J(0) - J(2Q)]$$

$$c' = S^2 [J(0) - J(3Q)]$$

Levando-se a expansão (V.1) no hamiltoniano (II.10), expandindo-se as funções $\cos \vec{Q} \cdot (\vec{R}_\ell - \vec{R}_{\ell'})$ e $\sin \vec{Q} \cdot (\vec{R}_\ell - \vec{R}_{\ell'})$ em torno do ponto $\vec{Q} \cdot (\vec{R}_\ell - \vec{R}_{\ell'})$ e as funções $\cos 2\vec{Q} \cdot \vec{R}_\ell$ e $\sin 2\vec{Q} \cdot \vec{R}_\ell$ em torno de $\vec{Q} \cdot \vec{R}_\ell$, e fazendo-se as transformadas de Fourier devidas, obtemos:

$$K_2 = \sum_{\vec{q}} K_{2\vec{q}} \quad (V.4)$$

$$\begin{aligned}
\chi_{2q} = & A'_q a_q^+ a_q + B'_q (a_q a_{-q} + a_q^+ a_{-q}^+) \\
& + \frac{0S\hbar}{8} (a_q a_{-2q-q} + a_q a_{2q-q} + a_q^+ a_{2q-q}^+ + a_q^+ a_{-2q-q}^+) \\
& + \frac{0(S\hbar^2 + 2S - 1)}{4} (a_q^+ a_{q-2q} + a_q^+ a_{2q+q}) + \frac{i g \mu_B H}{2} (a_q^+ a_{q+q} - a_q^+ a_{-q+q}) \\
& + 0 \left\{ C_q (a_q a_{-q-2q} + a_q^+ a_{-q-2q}^+) + C_{-q} (a_q a_{2q-q} + a_q^+ a_{2q-q}^+) \right. \\
& \quad \left. + E_q a_q^+ a_{q-2q} + E_{-q} a_q^+ a_{q+2q} \right\} \\
& - i g \mu_B H \left\{ T_q (a_q a_{-q-q} - a_q^+ a_{-q-q}^+) - T_{-q} (a_q a_{q-q} - a_q^+ a_{q+q}^+) \right. \\
& \quad \left. + Y_q a_q^+ a_{q-q} - Y_{-q} a_q^+ a_{q+q} \right\} \quad (V.5)
\end{aligned}$$

onde:

$$A'_q = -\frac{S}{4} [J(q+q) + J(q-q) + 2J(q) - 4J(q)] \quad (V.6a)$$

$$B'_q = -\frac{S}{8} [J(q+q) + J(q-q) - 2J(q)] \quad (V.6b)$$

$$C_q = \frac{S}{8} \frac{(S^2 - \frac{S}{2})}{(a' - c')} [2J(q+q) - J(q+3q) - J(q-q)] \quad (V.6c)$$

$$E_q = \frac{S}{4} \frac{(S^2 - \frac{S}{2})}{(a' - c')} [2J(q-q) - J(q-3q) - J(q+q) + 2J(3q) - 2J(q)] \quad (V.6d)$$

$$T_q = \frac{S}{8} \frac{1}{(b' - 2a')} [J(q+2q) + J(q-q) - J(q) - J(q+q)] \quad (V.6e)$$

$$\begin{aligned}
Y_q = & \frac{S}{4} \frac{1}{(b' - 2a')} [J(q-2q) + J(q+q) - J(q) - J(q-q) \\
& - 2J(2q) + 2J(0)] \quad (V.6f)
\end{aligned}$$

Escrevendo-se as equações de movimento de Heisenberg para o hamiltoniano \mathcal{H}_{2q} , obtemos:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{da_k}{dt} &= [a_k, \mathcal{H}_{2q}] = 2B'_k a_{-k}^\dagger + A'_k a_k \\
 &+ \frac{DS}{4} (a_{2q-k}^\dagger + a_{-2q-k}^\dagger) + \frac{D(S^2+2S-1)}{4} (a_{k-2q} + a_{2q+k}) \\
 &+ i \frac{g u_0 H}{2} (a_{q+k} - a_{-q+k}) + D \left\{ (C_k + C_{-k-2q}) a_{-k-2q}^\dagger \right. \\
 &+ (C_{-k} + C_{k-2q}) a_{2q-k}^\dagger + E_k a_{k-2q} + E_{-k} a_{k+2q} \left. \right\} \\
 &- i g u_0 H \left\{ -(T_k + T_{-k-q}) a_{-k-q}^\dagger + (T_{-k} + T_{k-q}) a_{-k+q}^\dagger \right. \\
 &+ \gamma_k a_{k-q} - \gamma_{-k} a_{k+q} \left. \right\}
 \end{aligned}$$

(V.7a)

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{da_{-k}^\dagger}{dt} &= [a_{-k}^\dagger, \mathcal{H}_{2q}] = -2B_k a_k - A_k a_{-k}^\dagger \\
 &- \frac{DS}{4} (a_{-2q+k} + a_{2q+k}) - \frac{D(S^2+2S-1)}{4} (a_{2q-k}^\dagger + a_{-2q-k}^\dagger) \\
 &+ i \frac{g u_0 H}{2} (a_{-k+q}^\dagger - a_{-k-q}^\dagger) - D \left\{ (C_{-k} + C_{k-2q}) a_{k-2q} \right. \\
 &+ (C_k + C_{-k-2q}) a_{2q+k} + E_{-k+2q} a_{-k+2q}^\dagger + E_{k+2q} a_{-k-2q}^\dagger \left. \right\} \\
 &+ i g u_0 H \left\{ (T_{-k} + T_{-q+k}) a_{-q+k} - (T_k + T_{-q-k}) a_{q+k} \right. \\
 &+ \gamma_{-k+q} a_{-k+q}^\dagger - \gamma_{k+q} a_{-k-q}^\dagger \left. \right\}
 \end{aligned}$$

(V.7b)

Precisaríamos agora escrever as equações de movimento de Heisenberg para os operadores $a_{\pm 2Q+k}$ e $a_{\pm 2Q+k}^+$ que por sua vez dariam origem a operadores do tipo $a_{\pm nQ+k}$ e $a_{\pm nQ+k}^+$, onde $n = 3, 4$. Teríamos que escrever as equações de movimento também para estes operadores, que dariam origem a novos operadores, de forma que nunca teríamos sistema de equações fechado. Por isso, vamos estudar apenas o caso para os vetores de onda $\vec{k} = 0$. Das equações (V.7) vemos que as equações de movimento dos operadores a_0 e a_0^+ , que se referem ao caso $\vec{k} = 0$, estão ligados aos operadores $a_{\pm nQ}$ e $a_{\pm nQ}^+$, com $n = 1, 2$. Para obtermos um sistema de equações fechado, portanto, vamos escrever as equações (V.7) para os seguintes vetores de onda: $\vec{k} = 0, \pm \vec{Q}$ e $\pm 2\vec{Q}$ e desprezar operadores do tipo $a_{\pm nQ}^+$ e $a_{\pm nQ}$, onde $n = 3, 4$, que são operadores que estão ligados a perturbação de segunda ordem e não estão sendo aqui considerados. Com isso, obtemos as seguintes equações:

$$i\hbar \frac{da_0}{dt} = A_0 a_0 + 2B_0 a_0^+ + iX(0)b_Q + iW(0)b_{-Q}^+ + V(0)b_{2Q} + S(0)b_{-2Q}^+$$

$$i\hbar \frac{da_0^+}{dt} = -2B_0 a_0 - A_0 a_0^+ - iW(0)b_Q - iX(0)b_{-Q}^+ - S(0)b_{2Q} - V(0)b_{-2Q}^+$$

$$i\hbar \frac{db_Q}{dt} = -2iX(0)a_0 - 2iW(0)a_0^+ - F(Q)b_Q - K(-Q)b_{-Q}^+ + iX(-Q)b_{2Q} + iW(Q)b_{-2Q}^+$$

$$i\hbar \frac{db_{-Q}^+}{dt} = 2iW(0)a_0 + 2iX(0)a_0^+ + K(-Q)b_Q + F(Q)b_{-Q}^+ - iW(Q)b_{2Q} - iX(-Q)b_{-2Q}^+$$

$$i\hbar \frac{db_{2Q}}{dt} = 2V(0)a_0 + 2S(0)a_0^+ - iX(-Q)b_Q - iW(Q)b_{-Q}^+ + A_{2Q}b_{2Q} + 2B_{2Q}b_{-2Q}^+$$

$$i\hbar \frac{db_{-2Q}^+}{dt} = -2S(0)a_0 - 2V(0)a_0^+ + iW(Q)b_Q + iX(-Q)b_{-Q}^+ - 2B_{2Q}b_{2Q} - A_{2Q}b_{-2Q}^+$$

(V.8)

onde:

$$b_q = (a_q - a_{-q})$$

$$b_{-q}^+ = (a_{-q}^+ - a_q^+)$$

$$b_{2q} = (a_{2q} + a_{-2q})$$

$$b_{-2q}^+ = (a_{-2q}^+ + a_{2q}^+)$$

(V.9)

$$X(0) = g\mu_B H \left[\frac{1}{2} + \gamma_0 \right]$$

$$W(0) = 2 g\mu_B H T_0$$

$$S(0) = \frac{DS\{\}}{4} + 2DC_0$$

$$V(0) = \frac{D(S\{\}^2 + 2S - 1)}{4} + DE_0$$

$$F(q) = \frac{D(S\{\}^2 + 2S - 1)}{4} + DE_q - A'_q$$

$$K(-q) = \frac{DS\{\}}{4} + 2DC_{-q} - 2B'_q$$

De (V.8) obtemos o seguinte determinante para os modos do sistema na aproximação considerada:

$$\begin{vmatrix}
 (\hbar\omega - A'_0) & -2B'_0 & -iX(0) & -iW(0) & -V(0) & -S(0) \\
 2B'_0 & (\hbar\omega + A'_0) & iW(0) & iX(0) & S(0) & V(0) \\
 2iX(0) & 2iW(0) & (\hbar\omega + F(Q)) & k(-Q) & -iX(-Q) & -iW(Q) \\
 -2iW(0) & -2iX(0) & -k(-Q) & (\hbar\omega - F(Q)) & iW(Q) & iX(-Q) \\
 -2V(0) & -2S(0) & iX(-Q) & iW(Q) & (\hbar\omega - A'_{2Q}) & -2B'_{2Q} \\
 2S(0) & 2V(0) & -iW(Q) & -iX(-Q) & 2B'_{2Q} & (\hbar\omega + A'_{2Q})
 \end{vmatrix} = 0$$

(V.10)

As soluções deste sistema são difíceis de serem obtidas, pois a equação de 6º grau resultante apresenta soluções analíticas apenas para valores selecionados do campo e da anisotropia. Contudo, podemos resolver este determinante numericamente e obtermos o espectro de frequência em função do campo magnético para diversos valores da anisotropia.

Se $H = 0$ e $D = 0$ a solução de (V.10) é facilmente encontrada e verifica-se que neste caso apenas o modo $\vec{q} = 2\vec{Q}$ é excitado, e temos que, $\hbar\omega_{2Q} = (A_{2Q}^2 - 4B_{2Q}^2)^{1/2}$.

Na figura (V.1) mostramos esquematicamente que a variação da frequência em função do campo magnético para $D = 1$ e para os vetores de onda $\vec{q} = \vec{Q}$ e $2\vec{Q}$.

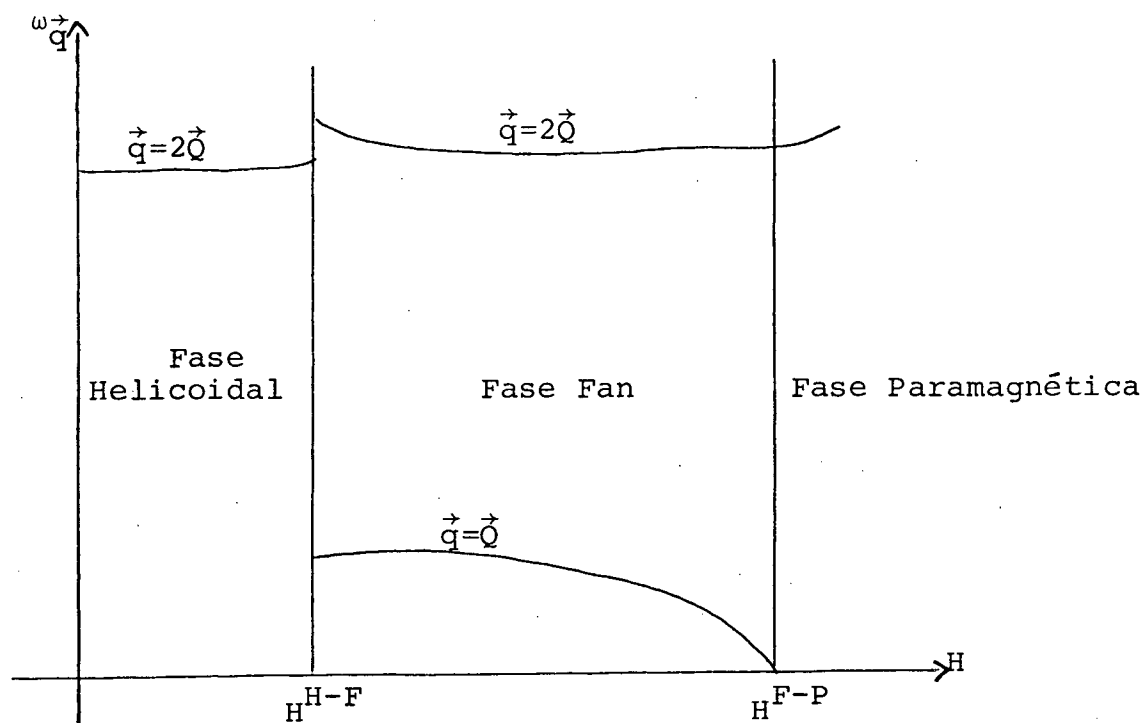


Figura V.1 - Variação da frequência para os vetores de onda $\vec{q} = \vec{Q}, 2\vec{Q}$ em função do campo magnético para $D = 1$, $J_0 = 1$, $J_1 = 2$, e $J_2 = -1$. H^{H-F} e H^{F-P} são os campos da transição hélice-fan e fan-paramagnética, respectivamente.

Na fase helicoidal apenas o modo para o vetor de onda $\vec{q} = 2\vec{Q}$ é excitado. Quando o campo magnético é igual ao campo da transição hélice-fan a energia deste modo sofre uma descontinuidade e passa a existir na fase fan. Embora tenhamos extrapolado nossos resultados para campos até a transição hélice-fan, a nossa aproximação é razoável apenas para campos pequenos na fase helicoidal, pois consideramos apenas termos até primeira ordem em H . O mesmo acontece na fase fan, onde a aproximação para valores pequenos de δ é boa apenas próxima da transição fan-paramagnética.

ca. Na fase fan esses dois modos são excitados, e na transição fan-paramagnética o modo $\vec{q} = \vec{Q}$ vai a zero, enquanto que o modo $\vec{q} = 2\vec{Q}$ não sofre nenhuma descontinuidade ao passar para a fase paramagnética. Devido à aproximação linear por nós considerada não é possível a excitação de modos de baixa energia na fase helicoidal.

Cooper e Elliott⁷ estudaram um problema semelhante, no qual a anisotropia é nula. A excitação dos modos de baixa energia só é possível se levarmos em conta os efeitos perturbativos do campo até segunda ordem.

Observamos também que quanto maior o valor da anisotropia, mais modos de baixa energia são excitados. Para $0 < D < 3,2$ apenas um modo é excitado. Quando $3,2 < D < 4$, dois modos são excitados e para $D > 4$, três modos são excitados. Entretanto esses resultados não devem ser considerados, pois a expansão dada pela equação (V.2) é válida apenas para valores da anisotropia bem menores que $(J(3Q) - J(Q))$, ver equação (V.3).

A descontinuidade notada no espectro de energia $\vec{q} = 2\vec{Q}$ é uma indicação de que a transição de fase entre as fases fan e helicoidal é de primeira ordem. Porém devemos observar que a determinação do campo crítico termodinâmico deve envolver a contribuição de todos os modos. Conforme discutimos anteriormente é uma tarefa árdua a determinação de todos os modos devido ao acoplamento de modos com vetor de onda $(\pm n\vec{Q} + \vec{k})$, $n \geq 2$, com o modo \vec{k} . Por isso acreditamos que a determinação da fronteira de fase hélice-fan na região de baixas temperaturas, através das excitações de ondas de spin, continua ainda um problema em aberto a ser investigado.

CONCLUSÕES

Neste trabalho estudamos as transições de fase num modelo de Heisenberg com anisotropia ortorrômbica de íon único na região de baixas temperaturas. Especificamente estudamos as transições de fase para o MnP, onde tomamos o campo magnético aplicado ao longo do eixo intermediário. Este modelo é semelhante ao usado por outros autores para descrever o ponto de Lifshitz neste composto.

Inicialmente consideramos o comportamento do sistema à temperatura zero. Obtivemos as transições entre as fases helicoidal, fan e paramagnética. A energia obtida na fase helicoidal não leva em consideração as distorções causadas pelo campo e anisotropia, e portanto o resultado obtido é estritamente válido para campo e anisotropia nulos. Na fase fan usamos uma expansão válida apenas para campos magnéticos próximos à transição fan-paramagnética, e o resultado obtido concorda com os resultados de Elliott e Nagamiya quando a anisotropia é nula.

Na fase paramagnética os spins se encontram todos alinhados com o campo e o resultado obtido é válido para qualquer região do campo magnético maior que o da transição paramagnética-fan.

Igualando-se as energias livres das fases helicoidal - fan e fan - paramagnética, obtivemos os campos das transições entre as três fases. É claro que o campo da transição helice-fan é uma extrapolação, uma vez que os resultados obtidos nestas duas fases são restritos às condições mencionadas acima. Finalmente calculamos as magnetizações nas três fases e encontramos que a transição entre as fases helicoidal e fan é de primeira ordem e a transição entre as fases fan e paramagnética é de segunda

ordem, concordando com os resultados experimentais.

Usando o formalismo de ondas de spin obtivemos o hamiltoniano nas três fases. Nas fases helicoidal e fan consideramos apenas a aproximação harmônica. Na fase paramagnética levamos em conta as interações entre as ondas de spin.

Na fase helicoidal usamos uma expansão válida para campos e anisotropias pequenas e, portanto, válidas para campos muito menores que o da transição hélice-fan. Obtivemos o espectro de frequências incompleto, considerando apenas três modos do sistema e, embora os resultados obtidos indiquem uma transição de primeira ordem para a fase fan, devemos salientar que nesta região da transição a expansão utilizada não é válida. Na fase fan encontramos o espectro de frequências completo, que é válido, no entanto, apenas próximo à transição fan-paramagnética.

Mostramos que na transição de fase paramagnética - fan, o campo magnético crítico varia assintoticamente com a temperatura segundo uma lei do tipo T^2 . Ainda não possuímos os resultados experimentais para verificar se o modelo por nós considerado é apropriado para o MnP às baixas temperaturas.

Muitas questões ainda precisam ser estudadas na região de baixas temperaturas. Destacamos as seguintes:

1) Determinação da fronteira de fase entre as fases fan e helicoidal dentro do formalismo de ondas de spin. Mesmo sem considerar as interações entre ondas de spin nestas fases é extremamente difícil de se obter o espectro de frequências para qualquer vetor de onda na zona de Brillouin.

2) Na determinação da fronteira de fase paramagnética-fan obtida no Capítulo III, levamos apenas parcialmente as interações entre as ondas de spin devido ao truncamento do hamiltoniano escrito em termos dos operadores de criação e des

truição. Se levarmos em conta termos de mais alta ordem, embora a dependência do campo crítico com a temperatura deva permanecer a mesma, o coeficiente da expansão assintótica deve mudar ligeiramente. Entretanto esse é um trabalho árduo de se realizar.

3) Estudar o caso em que o campo magnético é aplicado ao longo do eixo duro do MnP, tendo em vista os resultados experimentais obtidos por Becerra². Acreditamos que os cálculos para as transições entre as fases ali observadas seguem as mesmas linhas daqueles apresentados neste trabalho.

BIBLIOGRAFIA

1. T. Nagamiya, Solid State Phys. 20, 305, New York: Academic.
2. Y. Shapira, N.F. Oliveira Jr. and C.C. Becerra and S. Foner, Phys. Rev. B 29, 361 (1984).
3. S. Hiyamizu and T. Nagamiya, Intern J. Magnetism 2, 33 (1972).
4. A. Takase and T. Kasuya, J. Phys. Soc. Jpn. 47, 491 (1979).
5. F. Keffer, Spin Waves, in Handbuch der Physik, vol. XVIII/2, Ed. S. Flügge, Springer - Verlag (1966).
6. C.S.O. Yokoi, M.D. Coutinho-Filho and S.R. Salinas, Phys. Rev. B 29, 6341 (1984).
7. B.R. Cooper and R.J. Elliott, Phys. Rev. 131, 1043 (1963).
8. T. Holstein and H. Primakoff, Phys. Rev. 58, 1098 (1940).
9. J. Feder and E. Pytte, Phys. Rev. 168, 640 (1968).
10. W. Figueiredo and S.R. Salinas, Physica B 124B, 259 (1984).
11. F. Leoni and C. Natoli, Phys. Rev. B 4, 2243 (1971).
12. M. Cieplak, Phys. Rev. B 15, 5310 (1977).
13. L.I. Schiff, Quantum Mechanics, 3 ed, MacGraw-Hill, New York (1968).
14. B.R. Cooper and R.J. Elliott, S.J. Nehel and H. Suhl, Phys. rev. 127, 57 (1962).